

TESIS DE MAESTRÍA EN FÍSICA

**ESPECTROSCOPIAS DE *PUMP & PROBE*
APLICADAS AL ESTUDIO DE AISLANTES
TOPOLÓGICOS DE FLOQUET.**

Lucila Peralta Gavensky

Dr. Carlos A. Balseiro
Director

Miembros del Jurado
Dr. Gonzalo Torroba
Dr. Denis Feinberg
Dra. María José Sánchez

Diciembre de 2016

Teoría de la materia condensada.

Instituto Balseiro
Universidad Nacional de Cuyo
Comisión Nacional de Energía Atómica
Argentina

A mis padres, Lilia y Daniel.

Índice de contenidos

Índice de contenidos	ii
Resumen	iv
Abstract	vi
1. Introducción y motivación	1
2. Formalismo de Floquet-Bloch en sistemas topológicamente no triviales.	4
2.1. Teorema de Floquet-Bloch: perturbaciones periódicas.	4
2.2. Formalismo de dos tiempos: perturbaciones pulsadas.	6
2.3. Sistemas topológicamente no triviales.	9
2.4. El problema de la monocapa de grafeno irradiada.	10
2.5. Bicapa de grafeno irradiada: modelos de dos y cuatro bandas.	18
3. Teoría de fotoemisión resuelta en tiempo en sistemas fuera de equilibrio.	22
3.1. Tr-ARPES en una monocapa de grafeno.	27
3.1.1. Fotoemisión en grafeno en equilibrio.	28
3.1.2. Fotoemisión en grafeno irradiado.	29
3.2. Tr-ARPES en una monocapa de grafeno con un término de masa.	31
3.3. Tr-ARPES en una bicapa de grafeno irradiada.	38
4. Conductividad Hall de un sistema irradiado con pulsos ultra-cortos	43
4.1. Formulación del problema.	43
4.2. Hamiltoniano sin perturbación - Cuantización de la conductividad Hall	47
4.3. Respuesta ante un cambio súbito en el Hamiltoniano.	50
4.4. Encendido súbito de un campo electromagnético de frecuencia Ω	51
4.5. Encendidos completamente adiabáticos.	54
4.6. “Toy model”: Término de masa en el hamiltoniano de Dirac.	57
4.7. Resultados de la respuesta Hall en grafeno irradiado.	61

4.7.1. Respuesta Hall en los puntos de Dirac con $\varepsilon_F = 0$	66
4.7.2. Respuesta Hall en el gap dinámico $k_0 = \frac{\Omega}{2v_f}$	69
5. Conclusiones	72
Bibliografía	74
Publicaciones asociadas.	78
Agradecimientos	80

Resumen

La manipulación óptica ultra-rápida y las espectroscopías resueltas en tiempo han avanzado notablemente a lo largo de los últimos años, permitiendo el estudio experimental de sistemas fuera de equilibrio en escalas de tiempo ultra-cortas (\sim fs). Simultáneamente, la búsqueda de estados topológicos de la materia ha sido de gran interés en la física de la materia condensada desde el descubrimiento de los aislantes topológicos.

Combinando estos dos campos, esta tesis tiene como objetivo estudiar materiales de tipo grafeno, donde el acoplamiento de los grados de libertad electrónicos con un campo electromagnético externo produce la aparición de propiedades topológicas de interés. Los materiales donde una excitación continua de frecuencia bien definida produce la aparición de estados de borde clasificados por invariantes topológicos (como los números de Chern) se conocen como *aislantes topológicos de Floquet* (FTIs). La periodicidad temporal permite, en el marco de la teoría de Floquet, comprender la presencia de estados coherentes luz-materia con un determinado espectro de cuasi-energías. En el mismo se generan brechas prohibidas en las regiones irradiadas con luz circularmente polarizada al romper la simetría de inversión temporal.

Las preguntas que surgen naturalmente, a las que intentaremos dar respuesta en esta tesis, están relacionadas a cuánto se puede extender o tomar prestado de los conceptos de topología de un FTI perturbado en forma estacionaria cuando la excitación es reemplazada por un pulso corto (de una duración de unos pocos períodos asociados a la frecuencia del fotón incidente). En este trabajo se estudian en particular la técnica de fotoemisión resuelta tanto en tiempo como angularmente (tr-ARPES) y se realizan cálculos de respuesta Hall en este tipo de sistemas. A través de las simulaciones de fotoemisión se estudia la posibilidad de detectar tanto el espectro de cuasi-energías de Floquet como los cambios en la topología inducidos por la radiación. Se encuentra que la distribución de intensidades de los electrones foto-emitidos posee información de la estructura topológica de las funciones de onda perturbadas. Asimismo, los cálculos de conductividad Hall demuestran que la misma no se encuentra cuantizada y su relación a los invariantes topológicos no es directa. Aún así, las componentes de Fourier de la respuesta transversal generada por el pulso se encuentran en correspondencia con el

espectro de Floquet calculado en forma estacionaria. Por otro lado, se estudia el valor medio de esta magnitud y su relación a las poblaciones en las bandas de Floquet y a los números de Chern asociados a las mismas.

Palabras clave: TEORÍA DE FLOQUET, AISLANTES TOPOLÓGICOS, GRAFENO, ESPECTROSCOPIA ULTRA-RÁPIDA, TR-ARPES, CONDUCTIVIDAD HALL.

Abstract

Ultra-fast optical manipulation and time-resolved spectroscopies have had a remarkable progress over the last few years, allowing the experimental study of out of equilibrium systems in femto-second time scales. At the same time, the quest for novel topological states of matter triggered enormous research activity in condensed matter physics since the discovery of topological insulators.

Merging these two fields, this thesis focuses on the study of graphene-like systems where the coupling of the electronic degrees of freedom with an external electromagnetic field induces topological properties of interest. Materials where a continuous laser driving of well defined frequency produces the appearance of edge states classified by topological invariants (like Chern numbers) are known as *Floquet topological insulators* (FTIs). Temporal periodicity allows, in a Floquet theory scheme, the understanding of coherent light-matter states with a quasi-static band structure. Regions irradiated with circularly polarized laser acquire non-equilibrium energy gaps, product of broken time reversal symmetry.

Natural follow-up questions, which we will try to give an answer to, are related to what concepts of FTI's topology can be borrowed or extended when continuous-wave driving is replaced by a short laser pulse (with a typical duration of a few periods associated with the incident photon energy). In this work we study both time-resolved and angle-resolved photoemission spectroscopy (tr-ARPES) and the bulk Hall response of these systems. Through the photoemission simulations we study the possibility of detecting the quasi-energy Floquet spectrum and changes of topology induced by the radiation field. We find that the photo-electrons intensity distribution possesses information on the topology of the out of equilibrium wavefunctions. Likewise, the Hall conductance calculations show that this quantity is not quantized and it's not directly related to topological invariants. Nevertheless, the Fourier components of the transverse response generated by the pulse are in correspondence with the stationary Floquet spectrum. On the other hand, we study the mean value of this magnitude and it's relation to population of the Floquet bands and to the Chern numbers associated with them.

Keywords: FLOQUET THEORY, TOPOLOGICAL INSULATORS, GRAPHENE, ULTRA-FAST SPECTROSCOPY, TR-ARPES, HALL CONDUCTANCE.

Capítulo 1

Introducción y motivación

“Forever is composed of nows.”

— Emily Dickinson.

Las fases topológicas de la materia poseen muchas características llamativas, desde la cuantización precisa de ciertas propiedades macroscópicas, hasta la aparición de excitaciones fraccionarias y estados de borde quirales [1, 2]. Una clase importante de sistemas topológicos son los llamados aislantes de Chern (TI) [3]. Los TI, al igual que los aislantes ordinarios, poseen una brecha (*gap*) de energía separando la última banda electrónica ocupada de la primera banda desocupada. Sin embargo, la superficie o borde de un aislante topológico necesariamente presenta estados que cruzan el *gap*, protegidos por simetría de inversión temporal. La relación entre la estructura topológica del volumen (*bulk*) del material y los estados de borde se conoce como correspondencia *bulk-boundary*. La misma se encuentra de manifiesto en la estructura de las funciones de onda del *bulk*, ya que a partir de las mismas se pueden construir invariantes topológicos (como el número de Chern) que dan cuenta de la cantidad de estados de superficie en la interfaz de un TI. Una característica notable de los mismos es la existencia de conductividad Hall incluso en ausencia de un campo magnético externo. El modelo de Haldane [4] es un ejemplo famoso de los mismos, que considera un semimetal bidimensional en forma de panal de abejas. En el mismo hay una degeneración en puntos aislados de la zona de Brillouin entre el tope de la banda de valencia y el fondo de la banda de conducción, producto de la presencia tanto de simetría de inversión espacial como temporal (degeneración de Kramer). La ruptura de esta última simetría es esencial para la presencia del efecto Hall cuántico, y en su trabajo propone hacerlo agregando una densidad de flujo magnético local en dirección normal al plano del sistema con la misma simetría de la red y con flujo neto nulo en la celda unidad. Una forma de conseguir este efecto es a través de la perturbación del sistema con luz láser circularmente polarizada. Los TI inducidos por perturbaciones periódicas en el tiempo son llamados aislantes topológicos de Floquet (FTI). El campo de los FTI ha crecido

notablemente en los últimos años debido a que se han logrado medir sus propiedades tanto en redes de átomos fríos [5], grafeno [6] y fermiones de Dirac en la superficie de TI tridimensionales bajo irradiación externa [7], como también así en arreglos de guías de onda fotónicas [8].

Si bien a temperatura cero la correspondencia directa entre el número de Chern del estado fundamental, la conductividad Hall y los estados quirales de borde está bien establecida, muy poco se sabe respecto a su respuesta dinámica ante perturbaciones globales y dependientes del tiempo. Este aspecto es de relevancia en una variedad de contextos, desde la evolución temporal y la manipulación controlada de la preparación de fases topológicas, hasta la dinámica de las mismas al ser acopladas con un baño externo [9]. En estados térmicos lejos del equilibrio las propiedades topológicas de un hamiltoniano dependiente del tiempo y esta misma fase pueden no tener lugar y su relación a observables es todavía un tema abierto de discusión [10–15]. Estos escenarios de no-equilibrio son los que generalmente ocurren en los experimentos actuales de átomos fríos [16–20], donde a partir de un estado inicial topológicamente trivial el Hamiltoniano es perturbado hacia un régimen de parámetros donde se esperan obtener propiedades topológicas, atravesando una transición de fase. Sin embargo, es sabido que el número de Chern, aquel que caracteriza la topología del estado de equilibrio, se mantiene constante bajo una dinámica unitaria y coherente [21]. Esta aparente contradicción inmediatamente genera el desafío de entender qué manifestaciones de la topología pueden ser observadas en sistemas sometidos a perturbaciones pulsadas, donde no necesariamente se sigue en forma adiabática al estado fundamental de la fase topológica. El entendimiento del impacto de la topología en la respuesta fuera del equilibrio es crucial para desarrollos futuros y es la motivación principal del presente trabajo.

Si bien los aislantes topológicos de Floquet fueron ya bien estudiados teóricamente al estar sujetos a una radiación monocromática estacionaria en el tiempo [22–24], se han realizado muy pocos estudios detallados de estos sistemas al ser perturbados con pulsos ultra-cortos realistas y posibles de realizar en experimentos. El objetivo de este trabajo es así abordar el estudio de espectroscopías que constan de la excitación del sistema hacia un estado fuera de equilibrio con un correspondiente sondeo del estado dinámico generado (*pump & probe*).

En particular, se comienza por estudiar la fotoemisión resuelta angularmente y en tiempo (tr-ARPES), consistente en la extracción de electrones en estados ligados del material a través de pulsos láser de un ancho temporal del orden \sim fs y el posterior estudio de su energía e impulso. Esta técnica ha demostrado ser muy poderosa para medir relaciones de dispersión, dinámica de cuasi-partículas [25] e incluso la naturaleza quiral de los estados electrónicos de grafeno y multicapas de este material [26]. Sin embargo, no se ha reportado hasta el momento la posibilidad de obtener información

de la curvatura de Berry y su integral en la primera zona de Brillouin, asociada al número de Chern, como una medida de la topología de estos sistemas.

Por otro lado, se estudia la respuesta Hall dinámica generada a partir de perturbaciones dependientes del tiempo en sistemas de tipo grafeno utilizando teoría de respuesta lineal. Si bien todavía no se han publicado resultados experimentales de transporte en FTIs, en un trabajo reciente han observado corrientes inducidas en grafeno mediante pulsos ultra-cortos [27]. A pesar de que en este experimento no es posible obtener información acerca de la topología, representa un avance en las técnicas necesarias para la detección experimental de corrientes Hall. Desde el punto de vista teórico existen numerosos trabajos que estudian esta respuesta en el caso estacionario [28, 29] o con un protocolo de encendido súbito de la perturbación [12, 30]. Sin embargo se reportan en la mayoría de los casos únicamente valores medios a tiempos suficientemente largos, sin entrar en el detalle de la dinámica existente en los tiempos de duración típicos de un pulso.

Así, con el desafío de avanzar en el entendimiento y manejo de sistemas topológicamente no triviales y la posibilidad de su estudio a través de espectroscopías resueltas en tiempo, esta tesis se organiza de la siguiente manera: en el capítulo 2 se presenta una introducción a los FTI y al formalismo de Floquet-Bloch para abordar el problema de una perturbación periódica en el hamiltoniano. En el capítulo 3 se describe la teoría de la fotoemisión resuelta en tiempo en sistemas de no-equilibrio generados por una perturbación pulsada y su aplicación a los casos de estudio. En el capítulo 4 se presenta la teoría y los resultados obtenidos para la respuesta Hall dinámica ante perturbaciones dependientes del tiempo. Por último, en el capítulo 5 se presentan las conclusiones de la tesis.

Capítulo 2

Formalismo de Floquet-Bloch en sistemas topológicamente no triviales.

“It’s so easy when you know the lyrics.”

— Ella Fitzgerald.

En este capítulo se abordan las nociones teóricas necesarias para comprender la respuesta de un sistema ante una perturbación periódica de frecuencia angular Ω establecida de forma estacionaria, de forma tal que el hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}(t) = \hat{\mathcal{H}}(t + T)$, con $T = \frac{2\pi}{\Omega}$. Se introduce también el formalismo de dos tiempos, utilizado para comprender la evolución de la función de onda en casos donde existen dos escalas temporales bien definidas en la perturbación, una de ellas con determinada periodicidad temporal. Por otro lado, se presentan brevemente los tópicos y definiciones asociadas a los materiales con topología no trivial, con su correspondiente aplicación a los casos de estudio.

2.1. Teorema de Floquet-Bloch: perturbaciones periódicas.

Para comprender cómo un potencial periódico en el tiempo afecta a los grados de libertad electrónicos de un sistema es útil recordar el formalismo de Bloch en un sólido con periodicidad espacial. Es bien sabido que un electrón en un cristal se encuentra sujeto a un potencial con la periodicidad de la red de Bravais subyacente, es decir, $H(\mathbf{r}) = H(\mathbf{r} + \mathbf{R})$. El teorema de Bloch garantiza que la función de onda se puede expresar como

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

donde $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R})$ es una función estrictamente periódica y por tanto puede ser descompuesta en serie de Fourier a través de los vectores de la red recíproca \mathbf{G} . Esta forma de expresar a la función de onda enfatiza la relación conjugada existente entre \mathbf{r} y el cuasi-impulso cristalino \mathbf{k} . En los bordes de la zona de Brillouin los estados de Bloch se mezclan generando la presencia de brechas en la relación de dispersión electrónica, cuya magnitud se encuentra caracterizada por la escala de energía del potencial periódico.

El teorema de Bloch esbozado aquí es el análogo al teorema de Floquet, utilizado para resolver un Hamiltoniano dependiente del tiempo que cuenta con periodicidad temporal. El teorema de Floquet garantiza la existencia de un conjunto de soluciones de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo de la forma

$$|\psi_{\alpha}(t)\rangle = e^{-i\frac{\varepsilon_{\alpha}t}{\hbar}} |\phi_{\alpha}(t)\rangle, \quad (2.2)$$

donde $|\phi_{\alpha}(t)\rangle = |\phi_{\alpha}(t + T)\rangle$ son los modos de Floquet y ε_{α} son lo que se conoce por cuasi-energías. Los modos $|\phi_{\alpha}(t)\rangle$ y $e^{in\Omega t} |\phi_{\alpha}(t)\rangle$ corresponden al mismo estado físico, pero con cuasi-energías que difieren en $n\hbar\Omega$. Esta equivalencia es análoga a la existente entre estados de Bloch con un cuasi-impulso cristalino \mathbf{k} que difieren en un vector \mathbf{G} de la red recíproca.

El formalismo de Floquet permite resolver el problema dependiente del tiempo trabajando con un hamiltoniano efectivo independiente del tiempo y de dimensión infinita que incorpora el acoplamiento de la excitación con el sistema en estudio. Este espacio de mayor dimensión está definido como el producto directo del espacio de Hilbert usual y el de las funciones con periodicidad $\frac{2\pi}{\Omega}$ temporal, es decir $\mathcal{H} \otimes \mathcal{L}_2(0, T)$. Los estados de Floquet son soluciones de la ecuación

$$\hat{\mathcal{H}}_F |\phi_{\alpha}(t)\rangle = \varepsilon_{\alpha} |\phi_{\alpha}(t)\rangle, \quad (2.3)$$

donde $\hat{\mathcal{H}}_F = \hat{\mathcal{H}} - i\hbar\partial_t$ es el hamiltoniano de Floquet. Expandiendo el estado de Floquet y el hamiltoniano de interés $\hat{\mathcal{H}}(t)$ en sus respectivas componentes de Fourier:

$$\begin{aligned} |\phi_{\alpha}(t)\rangle &= \sum_{n=-\infty}^{n=\infty} e^{in\Omega t} |u_n^{\alpha}\rangle \\ \hat{\mathcal{H}}(t) &= \hat{\mathcal{H}}_0 + \sum_{l=-\infty}^{l=\infty} ' e^{il\Omega t} \hat{\mathcal{H}}_l, \end{aligned} \quad (2.4)$$

donde la suma primada indica que se excluye el término de $l = 0$, es decir, el término del hamiltoniano independiente del tiempo que se denota como $\hat{\mathcal{H}}_0$. Es posible de esta

forma obtener un conjunto de infinitas ecuaciones acopladas para estas componentes,

$$(\hat{\mathcal{H}}_0 + n\hbar\Omega) |u_n^\alpha\rangle + \sum_{l=-\infty}^{l=\infty} \hat{\mathcal{H}}_l |u_{n-l}^\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha |u_n^\alpha\rangle, \quad (2.5)$$

que matricialmente toman la forma

$$\tilde{\mathbf{H}}_F = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \mathbf{H}_0 + 2\hbar\Omega\mathbf{I} & \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_2 & \mathbf{H}_3 & \mathbf{H}_4 & \dots \\ \dots & \mathbf{H}_{-1} & \mathbf{H}_0 + \hbar\Omega\mathbf{I} & \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_2 & \mathbf{H}_3 & \dots \\ \dots & \mathbf{H}_{-2} & \mathbf{H}_{-1} & \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}_1 & \mathbf{H}_2 & \dots \\ \dots & \mathbf{H}_{-3} & \mathbf{H}_{-2} & \mathbf{H}_{-1} & \mathbf{H}_0 - \hbar\Omega\mathbf{I} & \mathbf{H}_1 & \dots \\ \dots & \mathbf{H}_{-4} & \mathbf{H}_{-3} & \mathbf{H}_{-2} & \mathbf{H}_{-1} & \mathbf{H}_0 - 2\hbar\Omega\mathbf{I} & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.6)$$

Notar que en la base de las componentes de Fourier $|u_n^\alpha\rangle$ el problema es independiente del tiempo y toma la forma de infinitas réplicas de Floquet desplazadas diagonalmente en $n\hbar\Omega$ y acopladas con el campo de radiación a través de todos sus armónicos. Los estados con diferente n interactúan generando la aparición de gaps dinámicos en los bordes de zona del espectro de cuasi-energías, análogos a las brechas prohibidas existentes en la relación de dispersión de un cristal debidas al potencial periódico espacial.

2.2. Formalismo de dos tiempos: perturbaciones pulsadas.

En el caso de un sistema sujeto a radiación monocromática de amplitud constante con una frecuencia Ω bien definida se conocen soluciones para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo a través del formalismo de Floquet. No es este el caso si la envolvente de la perturbación periódica posee una forma funcional no trivial en el tiempo, como el caso de un pulso electromagnético. En general, no se conocen soluciones analíticas para la evolución temporal de las funciones de onda sometidas a una perturbación pulsada en el tiempo, siendo aún un asunto de interés en la actualidad [31].

Interesa encontrar entonces un formalismo que permita tratar en forma independiente a distintas escalas temporales presentes en $H_{\mathbf{k}}(t) = H_{\mathbf{k}}[A(\tau), \Omega t]$, donde se denota $A(\tau)$ a la amplitud del pulso de radiación y se introduce una nueva variable de evolución τ para indicar el *tiempo lento*. De esta forma, el hamiltoniano sigue presentado periodicidad en el tiempo t , que denominaremos de aquí en más *tiempo rápido*.

La ecuación de Schrödinger extendida consistente con las dos variables temporales está dada por [32, 33]

$$(H_{\mathbf{k}}(\tau, t) - i\hbar\partial_t)|\psi(\tau, t)\rangle\rangle = \mathcal{H}_F(\tau, t)|\psi(\tau, t)\rangle\rangle = i\hbar\partial_\tau|\psi(\tau, t)\rangle\rangle, \quad (2.7)$$

donde $|\psi(\tau, t)\rangle\rangle$ es una función de onda de dos tiempos y el símbolo de $|\dots\rangle\rangle$ indica que la misma está definida en el espacio $\mathcal{H} \otimes \mathcal{L}_2(0, T)$ con el siguiente producto interno

$$\langle\langle\psi_\alpha(\tau)|\psi_\beta(\tau)\rangle\rangle = \frac{1}{T} \int_0^T \langle\psi_\alpha(\tau, t)|\psi_\beta(\tau, t)\rangle dt. \quad (2.8)$$

Es importante notar que el producto interno definido tiene sentido únicamente si la dinámica asociada a τ ocurre en una escala temporal lenta comparada con el período de la excitación T . En principio, los estados y los operadores que dependen de τ se modifican a lo largo del tiempo de integración de t . Sin embargo, al tratar ambas escalas como independientes, se está ignorando la evolución en el tiempo lento a lo largo de un período de la perturbación externa.

Nótese que el tiempo físico, y por tanto la función de onda física, se recupera si $|\psi(t)\rangle = |\psi(\tau, t)\rangle\rangle\big|_{\tau=t}$, ya que

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle &= i\hbar\partial_t|\psi(\tau, t)\rangle\rangle\big|_{\tau=t} + i\hbar\partial_\tau|\psi(\tau, t)\rangle\rangle\big|_{\tau=t} \\ &= i\hbar\partial_t|\psi(\tau, t)\rangle\rangle\big|_{\tau=t} + (H_{\mathbf{k}}(t) - i\hbar\partial_t)|\psi(\tau, t)\rangle\rangle\big|_{\tau=t} \\ &= H_{\mathbf{k}}(t)|\psi(t)\rangle, \end{aligned} \quad (2.9)$$

donde en la segunda igualdad de la Ec. (2.9) se utilizó la Ec. (2.7). Este formalismo es de relevancia en casos donde se puede tratar adiabáticamente la evolución en el tiempo lento. El hamiltoniano de Floquet $\mathcal{H}_F(\tau, t)$ es aquel que gobierna la evolución del tiempo τ , y por tanto la base adiabática se corresponde con las autofunciones de este operador:

$$\mathcal{H}_F(\tau, t)|\phi^\alpha(\tau, t)\rangle\rangle = \varepsilon_\alpha(\tau)|\phi^\alpha(\tau, t)\rangle\rangle. \quad (2.10)$$

En el límite adiabático total se pueden conocer analíticamente los estados evolucionados, siendo los mismos los estados instantáneos de Floquet con su correspondiente fase dinámica y geométrica [34]

$$\begin{aligned} |\psi^\alpha(\tau, t)\rangle\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar} \int^\tau \varepsilon_\alpha(\tau') d\tau'} e^{-i\gamma(\tau)} |\phi^\alpha(\tau, t)\rangle\rangle, \\ \gamma(\tau) &= -i \int^\tau \langle\langle\phi^\alpha(\tau')|\partial_{\tau'}\phi^\alpha(\tau')\rangle\rangle d\tau' \end{aligned} \quad (2.11)$$

Si se incluyeran correcciones adiabáticas a primer orden se obtiene el resultado

usual de la mecánica cuántica en este espacio extendido:

$$|\psi^\alpha(\tau, t)\rangle \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \int^\tau \varepsilon_\alpha(\tau') d\tau'} e^{-i\gamma(\tau)} \left[|\phi^\alpha(\tau, t)\rangle + i\hbar \sum_{\beta \neq \alpha} |\phi^\beta(\tau, t)\rangle \frac{\langle \phi^\beta(\tau) | \partial_\tau \phi^\alpha(\tau) \rangle}{\varepsilon_\beta(\tau) - \varepsilon_\alpha(\tau)} \right], \quad (2.12)$$

donde la diferencia de cuasi-energías instantáneas se encuentra restringida a una zona de Floquet determinada, siendo plausible de elegir particularmente entre $-\hbar\Omega/2$ y $\hbar\Omega/2$.

Se entiende luego que si los efectos del pulso electromagnético fueran completamente adiabáticos en todo el espectro la base de Floquet sería aquella que describe con fidelidad la respuesta temporal de los estados evolucionados. Para el tipo de pulsos accesibles experimentalmente (\sim fs), si bien es cierto que este es el caso para muchos estados \mathbf{k} de la zona de Brillouin, dista de ser una visión realista para aquellos resonantes con la radiación. En el espectro instantáneo de cuasi-energías se inducen y eliminan degeneraciones a lo largo del pulso, haciendo que los efectos de tunneling entre estados de Floquet sean relevantes.

Supongamos entonces que queremos describir la dinámica de la función de onda de dos tiempos, utilizando su propiedad de periodicidad en el tiempo rápido

$$|\psi^\alpha(\tau, t)\rangle = \sum_n e^{in\Omega t} |\chi_n^\alpha(\tau)\rangle, \quad (2.13)$$

introduciendo esta descomposición en la Ec. (2.7) encontramos un conjunto de ecuaciones de Schrödinger dependientes del tiempo acopladas para $\chi_n(\tau)$

$$\sum_{nl} \left[H_{\mathbf{k}}^{(l)}(\tau) |\chi_{n-l}(\tau)\rangle + \hbar n\Omega |\chi_n(\tau)\rangle \right] e^{in\Omega t} = i\hbar \sum_n \partial_\tau |\chi_n(\tau)\rangle e^{in\Omega t}, \quad (2.14)$$

donde $H_{\mathbf{k}}^{(l)}(\tau) = \frac{1}{T} \int_0^T e^{-il\Omega t} H_{\mathbf{k}}(\tau, t) dt$ son las componentes de Fourier del hamiltoniano original. Este conjunto de ecuaciones se puede escribir matricialmente como $H_F^\infty(\tau) |\bar{\chi}(\tau)\rangle = i\hbar \partial_\tau |\bar{\chi}(\tau)\rangle$

$$\begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \mathbf{H}_0 + 2\hbar\Omega\mathbf{I} & \mathbf{H}^{(1)}(\tau) & \mathbf{H}^{(2)}(\tau) & \mathbf{H}^{(3)}(\tau) & \mathbf{H}^{(4)}(\tau) & \dots \\ \dots & \mathbf{H}^{(-1)}(\tau) & \mathbf{H}_0 + \hbar\Omega\mathbf{I} & \mathbf{H}^{(1)}(\tau) & \mathbf{H}^{(2)}(\tau) & \mathbf{H}^{(3)}(\tau) & \dots \\ \dots & \mathbf{H}^{(-2)}(\tau) & \mathbf{H}^{(-1)}(\tau) & \mathbf{H}_0 & \mathbf{H}^{(1)}(\tau) & \mathbf{H}^{(2)}(\tau) & \dots \\ \dots & \mathbf{H}^{(-3)}(\tau) & \mathbf{H}^{(-2)}(\tau) & \mathbf{H}^{(-1)}(\tau) & \mathbf{H}_0 - \hbar\Omega\mathbf{I} & \mathbf{H}^{(1)}(\tau) & \dots \\ \dots & \mathbf{H}^{(-4)}(\tau) & \mathbf{H}^{(-3)}(\tau) & \mathbf{H}^{(-2)}(\tau) & \mathbf{H}^{(-1)}(\tau) & \mathbf{H}_0 - 2\hbar\Omega\mathbf{I} & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \chi_2(\tau) \\ \chi_1(\tau) \\ \chi_0(\tau) \\ \chi_{-1}(\tau) \\ \chi_{-2}(\tau) \\ \vdots \end{pmatrix} = i\hbar \partial_\tau \begin{pmatrix} \vdots \\ \chi_2(\tau) \\ \chi_1(\tau) \\ \chi_0(\tau) \\ \chi_{-1}(\tau) \\ \chi_{-2}(\tau) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Formalmente, definiendo al vector $\bar{\chi}(\tau)$ como aquel con componentes $\chi_n(\tau)$, su evolu-

ción está dada por

$$\begin{aligned} |\bar{\chi}(\tau)\rangle &= U_F^\infty(\tau, \tau_0) |\bar{\chi}(\tau_0)\rangle \\ U_F^\infty(\tau, \tau_0) &= \mathcal{T}\left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau} H_F^\infty(\tau') d\tau'}\right], \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde \mathcal{T} es el operador de orden temporal.

2.3. Sistemas topológicamente no triviales.

Los sistemas topológicos están caracterizados por una correspondencia entre sus propiedades de volumen (*bulk*) y su borde, dadas por un número entero conocido como el invariante de Chern. Éste puede ser entendido físicamente en términos de la fase de Berry asociada a las funciones de onda de Bloch en un sólido $|u_m(\mathbf{k})\rangle$. Es bien conocido que al evolucionar un estado caracterizado por su cuasi-impulso \mathbf{k} en un lazo cerrado en el espacio de fases del sistema, el estado adquiere una fase de Berry dada por la integral de línea de $\mathcal{A}_m = i \langle u_m | \nabla_{\mathbf{k}} | u_m \rangle$, conocida como la conexión de Berry [35]. La misma puede ser expresada a través de una integral de superficie de la curvatura de Berry $\mathcal{F}_m = \nabla \times \mathcal{A}_m$. El invariante de Chern es el flujo total de Berry en la zona de Brillouin [1], es decir:

$$\mathcal{C}_m = \frac{1}{2\pi} \int d^2\mathbf{k} \mathcal{F}_m^z. \quad (2.17)$$

En el caso de hamiltonianos de dos niveles, que admiten una descripción de la forma $\mathcal{H}_{\mathbf{k}} = \mathbf{h}_{\mathbf{k}} \cdot \boldsymbol{\sigma}$, el flujo de Berry se encuentra relacionado al ángulo sólido subtendido por el versor $\hat{h}(\mathbf{k}) = \mathbf{h}(\mathbf{k})/|\mathbf{h}(\mathbf{k})|$ de forma tal que la Ec. (2.17) adquiere la expresión

$$\mathcal{C} = \frac{1}{4\pi} \int d^2\mathbf{k} (\partial_{k_x} \hat{h} \times \partial_{k_y} \hat{h}) \cdot \hat{h}. \quad (2.18)$$

Esta integral cuenta el número de veces que el versor \hat{h} envuelve la esfera unidad. Notar que si $h_z = 0$ el versor se encuentra siempre en el plano del ecuador de la esfera, generando una curvatura de la fase de Berry \mathcal{F}_m^z y un Chern trivialmente nulos.

Existen sistemas que presentan carácter topológico, es decir, un Chern no trivial, solamente en forma dinámica. Un caso particular es el del grafeno, cuya simetría de inversión temporal y espacial en el equilibrio garantiza una curvatura de Berry estrictamente nula en cada punto de la zona de Brillouin. En este trabajo se tratan en particular los aislantes topológicos de Floquet (FTIs). En los mismos, la presencia de una perturbación periódica en el tiempo modifica los elementos de matriz de salto electrónicos del material irradiado de forma tal de imitar un flujo magnético [28]. Si bien los hamiltonianos dependientes del tiempo no conservan la energía, en el caso

particular de la presencia de cierta periodicidad en los mismos es posible definir un espectro de cuasi-energías con el formalismo de Floquet discutido anteriormente. En este lenguaje, los FTIs presentan un espectro de bandas de Floquet con una curvatura de Berry no nula y un dado número de Chern, generando por tanto la presencia de estados de borde en geometrías confinadas [23, 36, 37].

2.4. El problema de la monocapa de grafeno irradiada.

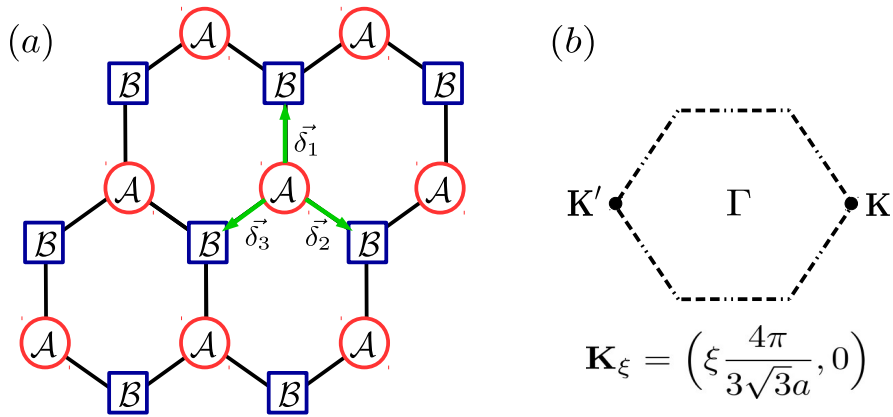


Figura 2.1: (a) Esquema de la red hexagonal del grafeno donde se indican los sitios de la subred \mathcal{A} y de la subred \mathcal{B} . (b) Esquema de la primera zona de Brillouin, donde se indican los puntos Γ , \mathbf{K} y \mathbf{K}' .

El grafeno es un alótropo del carbono constituido por una lámina de átomos de este elemento con hibridación sp^2 formando una red hexagonal bidimensional (ver Fig. 2.1). Esta red, en forma de panel de abejas, puede ser descripta a través de dos subredes triangulares \mathcal{A} y \mathcal{B} de forma tal que su celda unidad se encuentra compuesta por dos átomos. La distancia entre carbonos es del orden de $a = 1,42 \text{ \AA}$. Los tres orbitales resultantes de la hibridación yacen en un mismo plano formando enlaces de tipo σ en un ángulo de 120° mientras que el orbital $2p_z$ restante se encuentra ortogonal a éstos conformando los llamados enlaces π . Estos últimos son los que determinan la estructura de bandas de este material. Sus estados electrónicos pueden ser descriptos utilizando un modelo simple de electrones fuertemente ligados¹ a primeros vecinos, dando lugar a un hamiltoniano de la forma:

$$\hat{\mathcal{H}} = -t \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^\dagger & b_{\mathbf{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \Phi(\mathbf{k}) \\ \Phi^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}} \\ b_{\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \sum_{\mathbf{k}} \hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}, \quad (2.19)$$

¹del inglés *tight-binding*.

donde $t \simeq 2,7 \text{ eV}$ es el elemento de matriz de salto, los operadores $a_{\mathbf{k}}$ y $b_{\mathbf{k}}$ son operadores de destrucción fermiónicos correspondientes a las subredes \mathcal{A} y \mathcal{B} respectivamente y $\Phi(\mathbf{k}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\vec{\delta}_3}$, con $\vec{\delta}_1 = (0, a)$ y $\vec{\delta}_{2,3} = \frac{a}{2}(\pm\sqrt{3}, -1)$. La estructura de bandas resultante ($E_{\pm} = \pm t|\Phi(\mathbf{k})|$) se muestra en la Fig. 2.2. Como se puede observar existen ciertos puntos en la primera zona de Brillouin donde el gap entre las bandas se cierra en forma cónica. Realizando una aproximación del hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}}$ alrededor

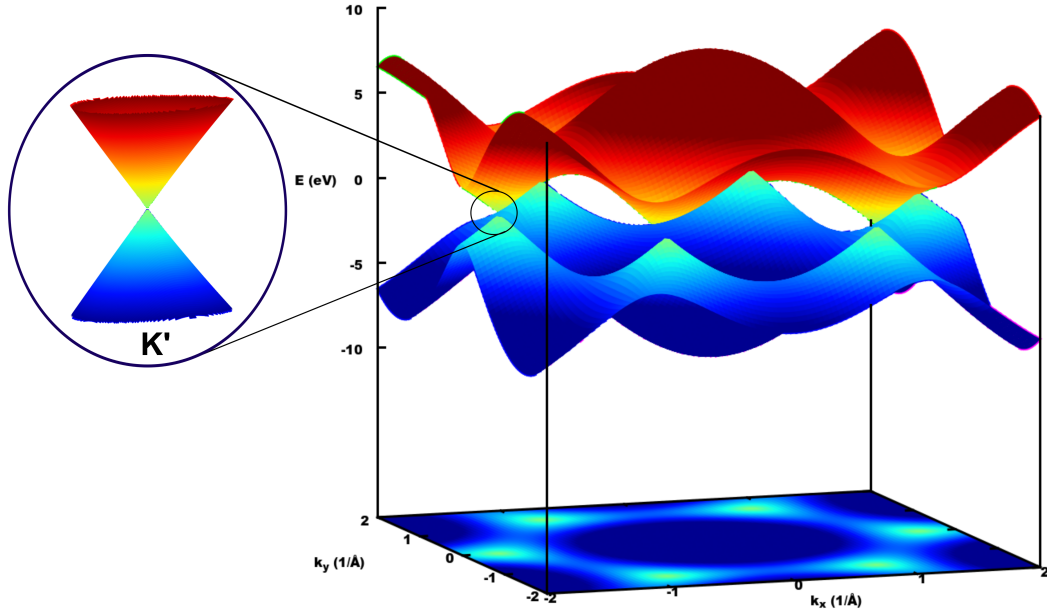


Figura 2.2: Relación de dispersión de una monocapa de grafeno. Se muestra una ampliación del cono de Dirac centrado en \mathbf{K}' .

de los cuasi-impulsos cristalinos $\mathbf{K}_{\xi} = \left(\xi \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a}, 0\right)$ donde $\xi = \pm 1$ indica el cono \mathbf{K} y el \mathbf{K}' respectivamente [ver Fig. 2.1(b)], es posible expresarlo en términos de las matrices de Pauli como

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\xi} = \hbar v_f(\xi k_x, k_y) \cdot \boldsymbol{\sigma} = v_f(\xi p_x, p_y) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.20)$$

donde $v_f = \frac{3ta}{2\hbar}$ se conoce como la velocidad de Fermi, con un valor característico de $\sim 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$, y $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ describe el grado de libertad de pseudo-espín generado por la presencia de las dos subredes \mathcal{A} y \mathcal{B} . La relación de dispersión de este hamiltoniano es lineal ($E_{\pm} = \pm \hbar v_f |\mathbf{k}|$), tomando la forma del llamado cono de Dirac. Los autovectores asociados a estas energías son de la forma:

$$|\Psi_{\mathbf{k}\pm}^{\xi}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \xi e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

donde $\theta_{\mathbf{k}}$ es el ángulo que forma el cuasi-impulso con el eje x.

El acoplamiento de este sistema con el campo electromagnético se puede realizar mediante la sustitución de Peierls ($\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + \frac{e\mathbf{A}}{c}$). Tomando de aquí en más $c = 1$, se

llega a la siguiente expresión para el hamiltoniano electrónico perturbado

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\xi}(t) = v_f \mathbf{\Pi}_{\mathbf{k}\xi} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.22)$$

donde $\mathbf{\Pi}_{\mathbf{k}\xi} = (\xi(\hbar k_x + eA_x), \hbar k_y + eA_y)$ es el momento canónico conjugado del sistema irradiado.

El potencial vector se define como $\mathbf{A}(t) = \Re[\mathbf{A}_0 e^{i\Omega t}]$, donde la envolvente del pulso toma una forma constante para ser consistente con el formalismo de Floquet y está dada por $\mathbf{A}_0 = A_0[\hat{\mathbf{x}} - i \text{tg}(\chi)\hat{\mathbf{y}}]$ siendo la $\text{tg}(\chi)$ aquella que define la elipticidad de su polarización. El desarrollo de $\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\xi}(t)$ en términos de sus componentes de Fourier se expresa entonces como

$$\hat{\mathcal{H}}_{\mathbf{k}\xi}(t) = \hat{\mathcal{H}}_0 + e v_f A_0 \xi \left(\boldsymbol{\sigma}_\xi(\chi) e^{i\Omega t} + \boldsymbol{\sigma}_{-\xi}(\chi) e^{-i\Omega t} \right), \quad (2.23)$$

donde $\boldsymbol{\sigma}_\xi(\chi) = \frac{\sigma_x + i\xi \text{tg}(\chi)\sigma_y}{2}$. La matriz de Floquet $\tilde{\mathbf{H}}_{\mathbf{F}\xi}$ de la Ec. (2.6) toma en este caso la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & v_f \mathbf{\Pi}_\xi \cdot \boldsymbol{\sigma} + \hbar\Omega \mathbf{I} & e v_f A_0 \xi \boldsymbol{\sigma}_{-\xi}(\chi) & \mathbf{0} & \dots \\ \dots & e v_f A_0 \xi \boldsymbol{\sigma}_\xi(\chi) & v_f \mathbf{\Pi}_\xi \cdot \boldsymbol{\sigma} & e v_f A_0 \xi \boldsymbol{\sigma}_{-\xi}(\chi) & \dots \\ \dots & \mathbf{0} & e v_f A_0 \xi \boldsymbol{\sigma}_\xi(\chi) & v_f \mathbf{\Pi}_\xi \cdot \boldsymbol{\sigma} - \hbar\Omega \mathbf{I} & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (2.24)$$

Notar que el acoplamiento con el campo de radiación se da únicamente a través de los primeros armónicos, es decir, $\Delta n = \pm 1$. La mezcla entre réplicas de Floquet se produce a través de las matrices de la diagonal superior ($\hat{\mathcal{V}}_\xi(\chi) = e v_f A_0 \xi \boldsymbol{\sigma}_{-\xi}$) e inferior ($\hat{\mathcal{V}}_\xi^\dagger(\chi) = e v_f A_0 \xi \boldsymbol{\sigma}_\xi$). En la Fig. 2.3 se indican las autoenergías asociadas a $\tilde{\mathbf{H}}_{\mathbf{F}}$ en el cono \mathbf{K} calculadas con un número finito de réplicas en el caso de radiación circularmente polarizada ($\chi = \frac{\pi}{4}$). Se muestra el espectro obtenido para una radiación incidente de $\hbar\Omega = 400$ meV y un campo tal que $e v_f A_0 = 140$ meV. El interés en el caso de polarización circular se debe a la ruptura de simetría de inversión temporal en el grafeno, brindando la posibilidad de generar gaps en el espectro de cuasi-energías de Floquet cada vez que hay un anticruce entre bandas. Notar que existe una jerarquía determinada en el orden de magnitud de los gaps generados. En particular, en el cuasi-impulso de resonancia $k_0 = \frac{\Omega}{2v_f}$, las autoenergías $\hbar\Omega - \hbar v_f |\mathbf{k}|$ y $\hbar v_f |\mathbf{k}|$ se vuelven degeneradas, haciendo que un valor finito de amplitud A_0 mezcle estas réplicas en su anticruce. Resolviendo el problema de Floquet en el subespacio de estas dos bandas

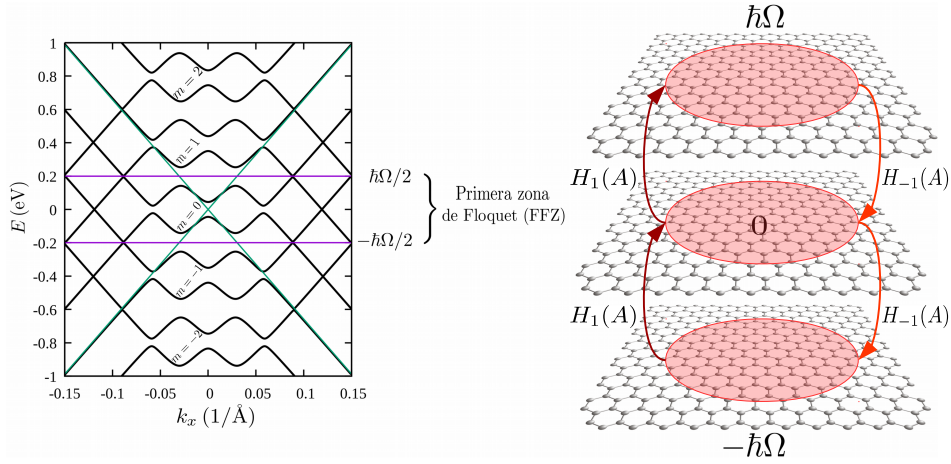


Figura 2.3: Dispersión de quasi-energías de Floquet en el esquema de zona extendida calculadas con un número finito de réplicas y un campo de radiación circularmente polarizado a lo largo de la dirección k_x . Se indica la primera zona de Floquet (FFZ). Se esquematiza en el panel derecho el acoplamiento entre las mismas a través de las componentes de Fourier de la perturbación: $H_1(A)$ y $H_{-1}(A)$, que generan la absorción y emisión de fotones.

[23], las quasi-energías alrededor de k_0 son tales que

$$\begin{aligned}\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\pm} &= \frac{\hbar\Omega}{2}(1 + \mu_{\pm}) \\ \mu_{\pm} &= \pm \sqrt{\left(1 - \frac{k}{k_0}\right)^2 + \eta^2},\end{aligned}\tag{2.25}$$

donde $\eta = \frac{ev_F A_0}{\hbar\Omega}$ es el parámetro adimensional que indica si el acoplamiento es fuerte o débil. En el límite de acoplamiento débil el gap es de $ev_f A_0$, lineal con el campo de radiación. Las autofunciones de Floquet que surgen de considerar únicamente los modos $n = 0$ y $n = 1$ son de la forma:

$$\begin{aligned}|\psi_{\mathbf{k}+}(t)\rangle &= \frac{e^{-i\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}+}t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left[\cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\eta}}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} + \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\eta}}{2}\right) e^{i(\Omega t + \theta_{\mathbf{k}})} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \right] \\ |\psi_{\mathbf{k}-}(t)\rangle &= \frac{e^{-i\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}-}t/\hbar}}{\sqrt{2}} \left[\sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\eta}}{2}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} - \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\eta}}{2}\right) e^{i(\Omega t + \theta_{\mathbf{k}})} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \right],\end{aligned}\tag{2.26}$$

con $\tan(\phi_{\mathbf{k}\eta}) = \frac{\eta}{1 - k/k_0}$. Un cálculo de la curvatura en cada valle con esta aproximación permite obtener la contribución al número de Chern proveniente de este anticruce:

$$C_{k_0}^{\xi} = -\frac{\eta^2}{k_0} \int_{k_0}^{\infty} \frac{dk}{[\eta^2 + (1 - \frac{k}{k_0})^2]^{\frac{3}{2}}} = -1.\tag{2.27}$$

En este caso hay un estado de borde que cruza el gap dinámico en cada valle (ver Fig. 2.4) y el mismo se ve reflejado en el cálculo del invariante topológico en el subespacio donde se produce la degeneración de las réplicas.

Alrededor de los conos \mathbf{K}_ξ se observa la aparición de un gap más pequeño. Para considerar el problema alrededor de $k = 0$ es necesario considerar el acoplamiento tanto con la réplica de $n = 1$ como con la de $n = -1$, conservando la simetría electrón-hueco del problema. Al orden más bajo, el hamiltoniano de Floquet alrededor de los cuasi-impulsos \mathbf{K}_ξ tiene la expresión:

$$\tilde{\mathcal{H}}_{\mathbf{F}\xi} = \begin{pmatrix} \tilde{\Delta}_\xi & \hbar v_f \xi |\mathbf{k}| e^{-i\xi\theta_{\mathbf{k}}} \\ \hbar v_f \xi |\mathbf{k}| e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} & -\tilde{\Delta}_\xi \end{pmatrix}, \quad (2.28)$$

donde $\tilde{\Delta}_\xi = -\xi \frac{(ev_f A_0)^2}{\hbar\Omega}$. Notar que en este caso aparece un gap que presenta dependencia cuadrática de valor $2 \frac{(ev_f A_0)^2}{\hbar\Omega}$, haciendo que el hamiltoniano de Dirac adquiera un término de masa $\tilde{\Delta}_\xi$ —proporcional a σ_z — con distinto signo en cada uno de los conos. Si bien los sitios de la subred \mathcal{A} y \mathcal{B} son equivalentes en el sistema sin perturbar, la radiación circularmente polarizada rompe esta simetría. Teniendo en cuenta en esta aproximación que $\tilde{\mathcal{H}}_{\mathbf{F}\xi} = \mathbf{h}_\xi \cdot \boldsymbol{\sigma}$, donde $\mathbf{h}_\xi = \left(\xi \hbar v_f k_x, \xi \hbar v_f k_y, \tilde{\Delta}_\xi \right)$, es posible calcular la contribución al Chern proveniente de ambos conos. Teniendo en cuenta la Ec. (2.18) se encuentra que

$$\mathcal{F}_\xi^z = -\xi \frac{(\hbar v_f)^2 \tilde{\Delta}_\xi}{2 \left((\hbar v_f k)^2 + \tilde{\Delta}_\xi^2 \right)^{\frac{3}{2}}}, \quad (2.29)$$

traduciéndose en un valor de \mathcal{C}_ξ en cada cono de la forma

$$\mathcal{C}_\xi = -\frac{\xi}{2} \text{sg}(\tilde{\Delta}_\xi). \quad (2.30)$$

Nótese que el flujo de la curvatura de Berry \mathcal{F}_ξ en ambos valles deja de ser trivial en el sistema irradiado y, al sumar sobre los mismos, la contribución al Chern total es no nula, siendo $\sum_\xi \mathcal{C}_\xi = 1$.

En la Fig. 2.4, obtenida de la Ref. [23], se muestra un mapa de color de la densidad de estados local $\rho(\varepsilon, \mathbf{k})$ proyectada en varios sitios cerca del borde de una superficie semi-infinita de grafeno como función de k_y . Se observa la aparición de los estados de borde que cruzan los diferentes gaps del espectro de cuasi-energías. Los dos estados del gap dinámico tienen la quiralidad opuesta a aquel que se presenta en el punto de Dirac, efecto reflejado en la diferencia de signo de las contribuciones al Chern de ambos gaps. El caso de luz linealmente polarizada ($\chi = 0$) no produce acoplamiento entre réplicas en la dirección de polarización. Mediante una rotación \mathcal{R}_ξ de $\tilde{\mathbf{H}}_{\mathbf{F}\xi}$ que diagonaliza a los términos $H_0 + n\hbar\Omega$ se pueden estudiar directamente los elementos de matriz de mezcla a través de $\tilde{\mathcal{V}}_\xi = \mathcal{R}_\xi^\dagger \hat{\mathcal{V}}_\xi(\chi) \mathcal{R}_\xi$. Por ejemplo, si la polarización del haz de luz incidente

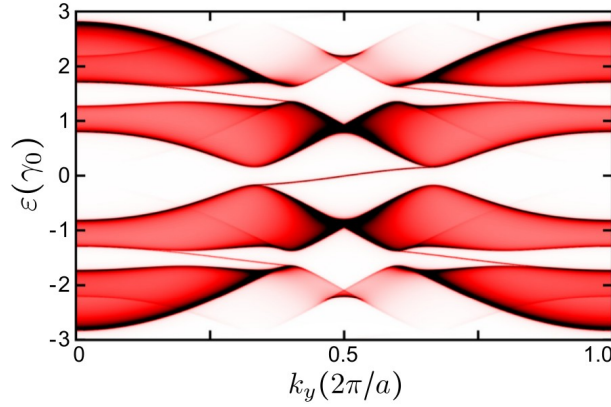


Figura 2.4: Mapa de color de la densidad de estados local $\rho(\varepsilon, \mathbf{k})$ proyectada en varios sitios cerca del borde de una superficie semi-infinita de grafeno como función de k_y obtenida de la Ref. [23] con $\gamma_0 = t \simeq 2,7 \text{ eV}$.

es tal que $\chi = 0$, la matriz de mezcla en el cono \mathbf{K} adquiere la siguiente expresión en la base rotada:

$$\tilde{\mathcal{V}}_1 = ev_f A_0 \begin{pmatrix} \cos(\theta_{\mathbf{k}}) & -i \sin(\theta_{\mathbf{k}}) \\ i \sin(\theta_{\mathbf{k}}) & -\cos(\theta_{\mathbf{k}}) \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

que toma una forma diagonal si $\sin(\theta_{\mathbf{k}}) = 0$, es decir, a lo largo del eje \hat{x} —aquel donde está orientada la polarización— impidiendo la aparición de gaps dinámicos.

Aproximación a la dinámica de la función de onda en los puntos de Dirac.

Se entiende entonces que en los estados \mathbf{k} cercanos a los conos de Dirac se produce la aparición de un gap cuadrático con la amplitud de la radiación en el espectro de cuasi-energías por un proceso virtual de absorción y emisión de un fotón. Se busca realizar una transformación canónica $S_\xi(\tau)$ para cada valle que mantenga los órdenes cuadráticos en el campo electromagnético con el fin de obtener una ecuación efectiva para la dinámica del tiempo lento τ cercana a estos gaps. Definiendo

$$|\tilde{\chi}_\xi(\tau)\rangle = e^{-S_\xi(\tau)} |\bar{\chi}_\xi(\tau)\rangle, \quad (2.32)$$

la ecuación de Schrödinger (2.15) para el vector de modos transformado es

$$[e^{-S_\xi(\tau)} H_F^\infty(\xi, \tau) e^{S_\xi(\tau)} - i\hbar e^{-S_\xi(\tau)} \frac{d}{d\tau} e^{S_\xi(\tau)}] |\tilde{\chi}_\xi(\tau)\rangle = i\hbar \partial_\tau |\tilde{\chi}_\xi(\tau)\rangle. \quad (2.33)$$

En el caso del grafeno irradiado con luz circularmente polarizada las componentes de Fourier de H_F^∞ son de la forma $H_0(\mathbf{k}, \xi) = \hbar v_f(\xi k_x \sigma_x + k_y \sigma_y)$, $H_\xi^{(1)}(\tau) = ev_f A(\tau) \frac{\xi \sigma_x - i \sigma_y}{2}$ y $H_\xi^{(-1)}(\tau) = ev_f A(\tau) \frac{\xi \sigma_x + i \sigma_y}{2}$ para cada valle. Expandiendo el primer término del lado izquierdo de la Ec. (2.33)

$$e^{-S_\xi(\tau)} H_F^\infty(\xi, \tau) e^{S_\xi(\tau)} = H_F^\infty(\xi, \tau) + [H_F^\infty(\xi, \tau), S_\xi(\tau)] + \frac{1}{2} [[H_F^\infty(\xi, \tau), S_\xi(\tau)], S_\xi(\tau)] + \dots \quad (2.34)$$

y descomponiendo $H_F^\infty(\xi, \tau) = H_0^\infty + ev_f A(\tau) H'^\infty(\xi)$, con

$$ev_f A(\tau) H'^\infty(\xi) = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \mathbf{0} & H_\xi^{(1)}(\tau) & \mathbf{0} & \dots \\ \dots & H_\xi^{(-1)}(\tau) & \mathbf{0} & H_\xi^{(1)}(\tau) & \dots \\ \dots & \mathbf{0} & H_\xi^{(-1)}(\tau) & \mathbf{0} & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

se debe pedir como condición para eliminar los términos lineales en $A(\tau)$ que

$$ev_f A(\tau) H'^\infty(\xi) + [H_0^\infty, S_\xi(\tau)] = 0. \quad (2.36)$$

La misma se verifica alrededor de $k = 0$ tomando

$$S_\xi(\tau) = \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \mathbf{0} & -\eta(\tau) \sigma_-(\xi) & \mathbf{0} & \dots \\ \dots & \eta(\tau) \sigma_+(\xi) & \mathbf{0} & -\eta(\tau) \sigma_-(\xi) & \dots \\ \dots & \mathbf{0} & \eta(\tau) \sigma_+(\xi) & \mathbf{0} & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.37)$$

con $\eta(\tau) = \frac{ev_f A(\tau)}{\hbar \Omega}$ y $\sigma_\pm(\xi) = \frac{\xi \sigma_x \pm i \sigma_y}{2}$. Se obtiene que a orden $A^2(\tau)$ la ecuación efectiva para $|\tilde{\chi}_\xi(\tau)\rangle$ está dada por

$$\left[H_0^\infty + \frac{ev_f A(\tau)}{2c} [H'^\infty(\xi), S_\xi(\tau)] - i \hbar \dot{S}_\xi(\tau) + \mathcal{O}[A^3(\tau)] \right] |\tilde{\chi}_\xi(\tau)\rangle = i \hbar \partial_\tau |\tilde{\chi}_\xi(\tau)\rangle, \quad (2.38)$$

donde se uso que $[S_\xi(\tau), \dot{S}_\xi(\tau)] = 0$. Denominando

$$H_{\text{eff}}(\xi, \tau) = H_0(\mathbf{k}, \xi) + \frac{1}{\hbar \Omega} [H_\xi^{(1)}(\tau), H_\xi^{(-1)}(\tau)] = H_0(\mathbf{k}, \xi) - \frac{[ev_f A(\tau)]^2}{\hbar \Omega} \xi \sigma_z, \quad (2.39)$$

se obtiene en este orden desarrollando la Ec. (2.38)

$$\begin{pmatrix} \ddots & & & & \\ \dots & H_{\text{eff}}(\xi, \tau) + \hbar\Omega\mathbf{I} & i\hbar\dot{\eta}(\tau)\sigma_-(\xi) & \mathbf{0} & \dots \\ \dots & -i\hbar\dot{\eta}(\tau)\sigma_+(\xi) & H_{\text{eff}}(\xi, \tau) & i\hbar\dot{\eta}(\tau)\sigma_-(\xi) & \dots \\ \dots & \mathbf{0} & -i\hbar\dot{\eta}(\tau)\sigma_+(\xi) & H_{\text{eff}}(\xi, \tau) - \hbar\Omega\mathbf{I} & \dots \\ \ddots & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vdots \\ \tilde{\chi}_1(\xi, \tau) \\ \tilde{\chi}_0(\xi, \tau) \\ \tilde{\chi}_{-1}(\xi, \tau) \\ \vdots \end{pmatrix} = i\hbar\partial_\tau \begin{pmatrix} \vdots \\ \tilde{\chi}_1(\xi, \tau) \\ \tilde{\chi}_0(\xi, \tau) \\ \tilde{\chi}_{-1}(\xi, \tau) \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

En el límite donde $\hbar\dot{\eta}(\tau) = \frac{ev_f\dot{A}(\tau)}{\Omega} \rightarrow 0$ los bloques diagonales quedan desacoplados. Nótese que este límite es menos restrictivo que el límite adiabático total, pues si bien la derivada del pulso puede ser finita, el mismo será válido para frecuencias de radiación suficientemente grandes. Las ecuaciones dependientes del tiempo para las n componentes $\tilde{\chi}_n(\xi, \tau)$ son entonces

$$\begin{aligned} [H_{\text{eff}}(\xi, \tau) + n\hbar\Omega\mathbf{I}] |\tilde{\chi}_n(\xi, \tau)\rangle &= i\hbar\partial_\tau |\tilde{\chi}_n(\xi, \tau)\rangle \\ |\tilde{\chi}_n(\xi, \tau)\rangle &= e^{-in\Omega\tau} U_{\text{eff}}^\xi(\tau, \tau_0) |\tilde{\chi}_n(\xi, \tau_0)\rangle \\ &= e^{-in\Omega\tau} \mathcal{T} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{\tau_0}^{\tau} H_{\text{eff}}(\xi, \tau') d\tau'} \right] |\tilde{\chi}_n(\xi, \tau_0)\rangle \\ &= e^{-in\Omega\tau} |\tilde{\chi}_0(\xi, \tau)\rangle \end{aligned} \quad (2.41)$$

Realizando la identificación $\Delta(\xi, \tau) = -\xi \frac{[ev_f\dot{A}(\tau)]^2}{c^2\hbar\Omega}$, se comprende que la dinámica del tiempo lento de cualquier observable cercana a estos valles estará gobernada por un hamiltoniano de Dirac donde se enciende un término de masa $\Delta(\xi, \tau)$ proporcional a σ_z . Finalmente, para expresar al vector de modos en la base original, basta con aplicar la transformación inversa de la Ec. (2.32) a segundo orden en $S_\xi(\tau)$

$$\begin{aligned} |\bar{\chi}_\xi(\tau)\rangle &\simeq \left[\mathcal{I}^\infty + S_\xi(\tau) + \frac{S_\xi^2(\tau)}{2!} \right] |\tilde{\chi}_\xi(\tau)\rangle \\ \chi_n(\xi, \tau) &= e^{-in\Omega\tau} \left[\mathcal{I}^{2 \times 2} \left(1 - \frac{\eta^2(\tau)}{2} \right) + \eta(\tau) [\sigma_+(\xi)e^{-i\Omega\tau} - \sigma_-(\xi)e^{i\Omega\tau}] \right] \tilde{\chi}_0(\xi, \tau). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Reemplazando el resultado en la Ec. (2.13) y haciendo $\tau = t$ para recuperar el resultado físico se obtiene para la función de onda

$$|\psi_\xi(\tau, t)\rangle \Big|_{\tau=t} = |\psi_\xi(t)\rangle = \left[\mathcal{I}^{2 \times 2} \left(1 - \frac{\eta^2(t)}{2} \right) + \eta(t) [\sigma_+(\xi)e^{-i\Omega t} - \sigma_-(\xi)e^{i\Omega t}] \right] |\tilde{\chi}_0(\xi, t)\rangle. \quad (2.43)$$

Nótese que la misma se encuentra normalizada a orden $\eta^2(t)$.

Presencia de un término de masa en el hamiltoniano de Dirac.

Un caso de interés es el del problema de una red hexagonal como el grafeno pero con sitios \mathcal{A} y \mathcal{B} inequivalentes. Este término genera una ruptura de simetría de inversión

en el hamiltoniano sin perturbar, provocando la existencia de un gap en la relación de dispersión electrónica. El siliceno, si bien presenta un pequeño acoplamiento espín-órbita ($\lambda_{SO} \simeq 4 \text{ meV}$) de efectos despreciables dentro de la incerteza de los experimentos de fotoemisión, es un buen ejemplo de este tipo de sistemas [38]. Las autoenergías son entonces cuadráticas alrededor de los puntos de Dirac: $\varepsilon_{\pm} = \pm \sqrt{\Delta^2 + (\hbar v_f k)^2}$. En este caso, el hamiltoniano de Floquet adquiere la misma forma que el anterior (ver Ec. (2.24)) pero con un término $\Delta \sigma_z$ extra en cada bloque de la diagonal. Las autofunciones alrededor de los cuasi-impulsos \mathbf{K}_{ξ} toman la forma

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{K}_{\xi}}^+\rangle &= \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{K}_{\xi}}}{2}\right) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle + \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{K}_{\xi}}}{2}\right) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle \\ |\Psi_{\mathbf{K}_{\xi}}^-\rangle &= \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{K}_{\xi}}}{2}\right) a_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle - \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{K}_{\xi}}}{2}\right) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} |0\rangle, \end{aligned} \quad (2.44)$$

donde el índice \pm indica la banda superior e inferior respectivamente, $\cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{K}_{\xi}}}{2}\right) = \frac{\xi \hbar v_f |\mathbf{k}|}{\sqrt{(\hbar v_f k)^2 + (\varepsilon_+ - \Delta)^2}}$ y $\sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{K}_{\xi}}}{2}\right) = \frac{\varepsilon_+ - \Delta}{\sqrt{(\hbar v_f k)^2 + (\varepsilon_+ - \Delta)^2}}$.

En este caso, al realizar un desarrollo del hamiltoniano de Floquet-Bloch resultante de una perturbación con polarización circular $\chi = \frac{\pi}{4}$ alrededor de los cuasi-impulsos \mathbf{K}_{ξ} se encuentra a orden más bajo una renormalización del término de masa:

$$\tilde{\Delta}_{\xi} = \Delta - \xi \frac{(ev_f A_0)^2}{\hbar \Omega - \xi \Delta}. \quad (2.45)$$

En el valle \mathbf{K} existe una amplitud de radiación crítica A_{0c} en la cual el gap entre bandas se cierra y luego de la cual la masa efectiva cambia su signo. Por otro lado, en \mathbf{K}' el gap crece para todo campo aplicado. Este fenómeno genera una transición de fase topológica en este tipo de sistemas ya que, una vez superado el campo crítico $A > A_{0c}$, las contribuciones al número de Chern suman una cantidad no trivial: $\sum_{\xi} \mathcal{C}_{\xi} = 1$. Si se cambia la quiralidad de la polarización de la excitación ($\chi = \frac{7\pi}{4}$) se invierte el efecto, generando un decremento en el gap de \mathbf{K}' y un aumento del mismo en \mathbf{K} .

2.5. Bicapa de grafeno irradiada: modelos de dos y cuatro bandas.

Un modelo realista de un sistema con violación de simetría inversión que se asemeja a un modelo de grafeno con masa es el caso de una bicapa de este material. Se tendrá en cuenta una configuración como la indicada en la Fig. 2.5(a), donde los sitios \mathcal{A}_1 de la monocapa superior se encuentran encima de los sitios \mathcal{B}_2 de la monocapa inferior. Debido a la orientación de los orbitales p_z en los átomos de carbono, el elemento de

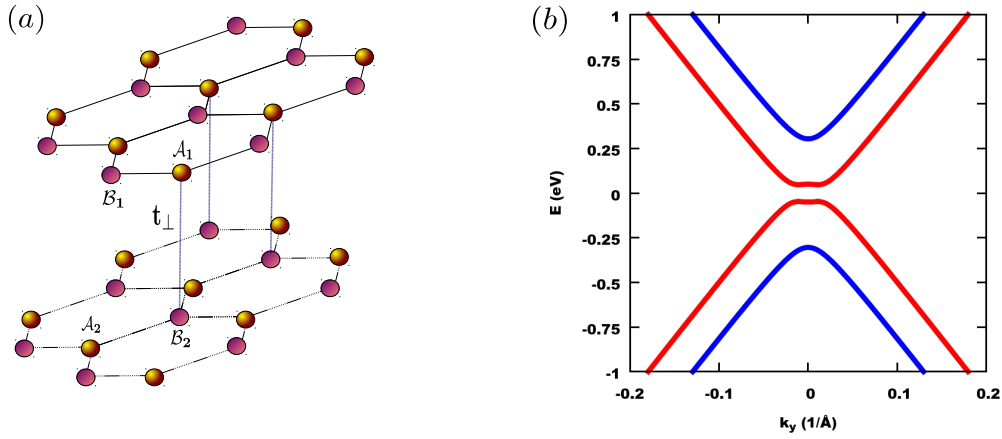


Figura 2.5: (a) Esquema de la configuración $\mathcal{A} - \mathcal{B}$ de una bicapa de grafeno con un elemento de matriz de salto de t_{\perp} entre capas. (b) Proyección en el plano $k_x = 0$ de la estructura de bandas de una bicapa de grafeno sometida a un potencial externo que genera una energía de sitio en la monocapa superior de $V = 50$ meV y $V = -50$ meV en la inferior.

matriz de salto entre monocapas dominante es el indicado como $t_{\perp} \simeq 0,3$ eV, que genera estados ligantes y antiligantes en la relación de dispersión. Si a este sistema se le aplica una diferencia de potencial constante V se rompe la simetría entre monocapas, traduciéndose en una diferencia de energía de sitio entre las mismas. El hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}_B$ toma en este caso la forma:

$$\hat{\mathcal{H}}_B = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}1}^{\dagger} & b_{\mathbf{k}1}^{\dagger} & a_{\mathbf{k}2}^{\dagger} & b_{\mathbf{k}2}^{\dagger} \end{pmatrix} \hat{\mathcal{H}}_{B\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}1} \\ b_{\mathbf{k}1} \\ a_{\mathbf{k}2} \\ b_{\mathbf{k}2} \end{pmatrix}, \quad (2.46)$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{B\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} V & \hbar v_f |\mathbf{k}| \xi e^{-i\xi\theta_k} & 0 & t_{\perp} \\ \hbar v_f |\mathbf{k}| \xi e^{i\xi\theta_k} & V & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -V & \hbar v_f |\mathbf{k}| \xi e^{-i\xi\theta_k} \\ t_{\perp} & 0 & \hbar v_f |\mathbf{k}| \xi e^{i\xi\theta_k} & -V \end{pmatrix}.$$

La proyección de la estructura de bandas obtenida en el plano $k_x = 0$ se muestra en la Fig. 2.5(b). Es posible realizar un modelo efectivo de este hamiltoniano de cuatro bandas considerando solamente las de menor energía (marcadas en rojo). Teniendo en cuenta que $\mathcal{H}_B = H_{t_{\perp}} + tH'$ se busca una transformación canónica \mathcal{S} tal que $\tilde{H}_{\text{eff}}^B = e^{-\mathcal{S}} \mathcal{H}_B e^{\mathcal{S}}$ y $[\mathcal{S}, H_{t_{\perp}}] = tH'$, de forma tal de mantener el segundo orden en la perturbación con

$$H_{t_{\perp}} = t_{\perp} \sum_{\mathbf{k}} (a_{1\mathbf{k}}^{\dagger} b_{2\mathbf{k}} + b_{2\mathbf{k}}^{\dagger} a_{1\mathbf{k}}), \quad (2.47)$$

$$tH' = \frac{3}{2} t a \sum_{j\mathbf{k}} (\xi k_{-\xi} a_{j\mathbf{k}}^{\dagger} b_{j\mathbf{k}} + \xi k_{\xi} b_{j\mathbf{k}}^{\dagger} a_{j\mathbf{k}}),$$

denotando por $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. Tomando

$$\mathcal{S} = \frac{3ta}{t_{\perp}} \sum_{\mathbf{k}} \left[\xi k_{-\xi} (b_{2\mathbf{k}}^{\dagger} b_{1\mathbf{k}} - a_{2\mathbf{k}}^{\dagger} a_{1\mathbf{k}}) + \xi k_{\xi} (a_{1\mathbf{k}}^{\dagger} a_{2\mathbf{k}} + b_{1\mathbf{k}}^{\dagger} b_{2\mathbf{k}}) \right], \quad (2.48)$$

es posible encontrar que el hamiltoniano efectivo para las bandas de menor energía a orden $\frac{t^2}{t_{\perp}}$ es de la forma

$$\tilde{H}_{\text{eff}}^B = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{2\mathbf{k}}^{\dagger} & b_{1\mathbf{k}}^{\dagger} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -V & \frac{9}{4} \frac{(ta)^2}{t_{\perp}} |\mathbf{k}|^2 e^{-i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} \\ \frac{9}{4} \frac{(ta)^2}{t_{\perp}} |\mathbf{k}|^2 e^{i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} & V \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{2\mathbf{k}} \\ b_{1\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (2.49)$$

Esencialmente, se obtiene un hamiltoniano similar al de una monocapa de grafeno debido a que se conserva la simetría hexagonal en los sitios \mathcal{B}_1 y \mathcal{A}_2 pero con un elemento de matriz de salto renormalizado y un factor 2 en la fase del pseudo-espín. El hamiltoniano de Floquet asociado a este sistema está dado por

$$\begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \tilde{H}_{\text{eff}}^B + 2\Omega\mathbf{I} & \mathbf{V}_{1\xi} & \mathbf{V}_{2\xi} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots \\ \dots & \mathbf{V}_{1\xi}^{\dagger} & \tilde{H}_{\text{eff}}^B + \Omega\mathbf{I} & \mathbf{V}_{1\xi} & \mathbf{V}_{2\xi} & \mathbf{0} & \dots \\ \dots & \mathbf{V}_{2\xi}^{\dagger} & \mathbf{V}_{1\xi}^{\dagger} & \tilde{H}_{\text{eff}}^B & \mathbf{V}_{1\xi} & \mathbf{V}_{2\xi} & \dots \\ \dots & \mathbf{0} & \mathbf{V}_{2\xi}^{\dagger} & \mathbf{V}_{1\xi}^{\dagger} & \tilde{H}_{\text{eff}}^B - \Omega\mathbf{I} & \mathbf{V}_{1\xi} & \dots \\ \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{V}_{2\xi}^{\dagger} & \mathbf{V}_{1\xi}^{\dagger} & \tilde{H}_{\text{eff}}^B - 2\Omega\mathbf{I} & \dots \\ \dots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad (2.50)$$

donde $\mathbf{V}_{1\xi} = \frac{2ev_f A_0}{t_{\perp}} \hbar |\mathbf{k}| e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \boldsymbol{\sigma}_{-\xi}(\chi)$ y $\mathbf{V}_{2\xi} = \frac{(ev_f A_0)^2}{t_{\perp}} \boldsymbol{\sigma}_{-\xi}(\chi)$. Notar que a diferencia de los casos anteriores, ocurren mezclas directas a través de los segundos armónicos del hamiltoniano de interacción. En los puntos \mathbf{K}_{ξ} el gap ocurre a orden más bajo a través de las réplicas $\pm 2\hbar\Omega$, debido a la proporcionalidad de $\mathbf{V}_{1\xi}$ con el módulo del cuasi-impulso cristalino. Realizando nuevamente un desarrollo a partir del hamiltoniano de Floquet para $\chi = \frac{\pi}{4}$ alrededor de los puntos de Dirac es posible encontrar una renormalización del potencial V aplicado:

$$\tilde{V}_{\xi} = V + \xi \frac{(ev_f A_0)^4}{t_{\perp}^2 (2\hbar\Omega + \xi V)}. \quad (2.51)$$

El invariante de Chern para cada uno de ellos toma la forma

$$\mathcal{C}_{\xi} = -\xi \frac{\tilde{V}_{\xi}}{\pi} \int d^2 \mathbf{k} \frac{(\hbar v_f)^4 k^2 / t_{\perp}^2}{\left((\hbar v_f k)^4 / t_{\perp}^2 + \tilde{V}_{\xi}^2 \right)^{\frac{3}{2}}} = -\xi \text{sg}(\tilde{V}_{\xi}). \quad (2.52)$$

Este sistema presenta entonces una transición de fase topológica cuando el término

de potencial efectivo en el cono \mathbf{K}' se hace nulo, asemejándose al modelo de una monocapa de grafeno con diferentes energías de sitio. En este caso, para magnitudes de campo mayores que la crítica, se espera la presencia de dos estados de borde alrededor de estos gaps $\sum_{\xi} \mathcal{C}_{\xi} = 2$.

Capítulo 3

Teoría de fotoemisión resuelta en tiempo en sistemas fuera de equilibrio.

“Time is beginning to flow again.”

— Simone de Beauvoir.

En la descripción previa se ha asumido que la perturbación periódica se mantenía en forma estacionaria en el tiempo. Si bien el formalismo de Floquet es útil para comprender la física de estos sistemas es necesario considerar que, en la mayoría de los casos, experimentalmente se tiene acceso a los mismos a través de técnicas pulsadas. En este capítulo se describe en particular la técnica de fotoemisión resuelta angularmente y en tiempo (tr-ARPES), considerando la evolución temporal de los grados de libertad electrónicos luego de que un pulso de excitación, llamado de aquí en más *pump*, lleva al sistema a un estado fuera de equilibrio. La técnica se esquematiza en la Fig. 3.1, donde una muestra de grafeno se encuentra irradiada con un pulso de *pump* de energía $\hbar\Omega$ y cuya dependencia temporal está descrita por el potencial vector $\mathbf{A}_p(t)$. El segundo pulso, de mayor frecuencia, denominado *probe* es aquel que produce la fotoemisión de los electrones. El mismo actúa durante el tiempo de duración de la perturbación del primer pulso sensando, en función del tiempo de retardo entre ambos, la energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ y el impulso \mathbf{k} de los electrones fotoemitidos en forma angular.

Se presenta aquí la teoría general de fotoemisión formulada por J. Braun *et al* [39] aplicada a los casos de interés, es decir, sistemas topológicamente no triviales. Se considera como hipótesis que las partículas se pueden considerar independientes, *i.e.* no se tomarán en cuenta efectos de interacción electrón-electrón ni electrón-fonón como simplificación del problema. A tiempos anteriores a la excitación, el sistema con espectro determinado por \mathcal{H}_0 , se encuentra en un equilibrio térmico dado por

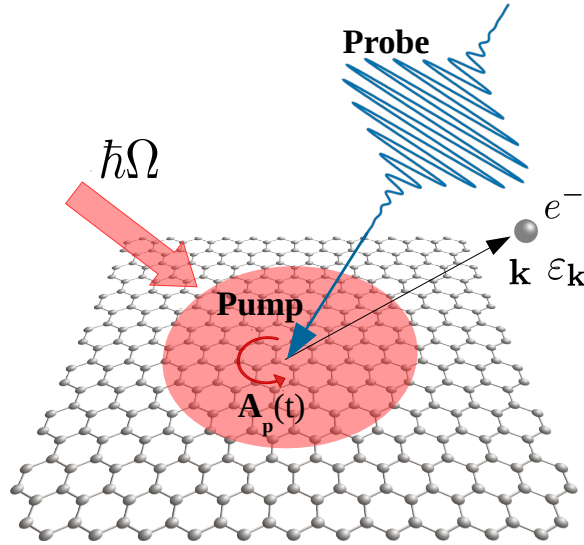


Figura 3.1: Esquema de una muestra de grafeno irradiada con un pulso de pump de energía $\hbar\Omega$. El pulso de probe actúa durante el tiempo de duración de la perturbación del primer pulso, fotoemitiendo electrones de impulso \mathbf{k} y energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

el parámetro de Boltzmann $\beta = \frac{1}{k_B T}$ y el potencial químico μ . Llamando $|\Psi_m\rangle$ a los autoestados del hamiltoniano \mathcal{H}_0 con energía E_m , la matriz densidad asociada al mismo será de la forma:

$$\rho(-\infty) = \sum_m f(E_m) |\Psi_m\rangle \langle \Psi_m|, \quad (3.1)$$

con $f(E_m) = \frac{1}{e^{\beta E_m} + 1}$ la función de ocupación de Fermi-Dirac. Si el sistema se encuentra sujeto a un pulso de luz, descrito por un hamiltoniano de interacción $\hat{v}(t)$, la nueva matriz densidad dependiente del tiempo será tal que:

$$\rho(t) = \sum_m f(E_m) |\Psi_m(t)\rangle \langle \Psi_m(t)|. \quad (3.2)$$

La misma debe tratarse de forma no perturbativa, siendo formalmente descrita por la propagación temporal de cada estado,

$$|\Psi_m(t)\rangle = \mathcal{U}(t, -\infty) |\Psi_m\rangle, \quad (3.3)$$

por medio del operador de evolución temporal

$$\mathcal{U}(t, t') = \mathcal{T} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t \mathcal{H}(\tau) d\tau\right), \quad (3.4)$$

donde \mathcal{T} es el operador de orden temporal y $\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \nu(t)$. Luego de un cierto tiempo Δt desde la llegada del pulso de excitación, el estado de no-equilibrio es sensado por un segundo pulso, denominado de aquí en más *probe*, determinado por un término de interacción $\mathcal{W}(t)$. Se asume que este segundo pulso es no nulo para tiempos $t_0 < t < t_1$. Describiendo por un lado a los estados electrónicos ocupados con operadores fermiónicos c_α^\dagger y c_α y por otro a los fotoelectrones, aquellos estados de *scattering* de alta energía, a través de los operadores $a_{\mathbf{k}}^\dagger$ y $a_{\mathbf{k}}$ es posible expresar $\mathcal{W}(t)$ como

$$\mathcal{W}(t) = \mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t) \sum_{\mathbf{k}, \alpha} \left(M_{\mathbf{k}\alpha} a_{\mathbf{k}}^\dagger c_\alpha + M_{\mathbf{k}\alpha}^* c_\alpha^\dagger a_{\mathbf{k}} \right). \quad (3.5)$$

En esta expresión $\mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t)$ describe el perfil temporal del pulso de sondeo y $M_{\mathbf{k}\alpha}$ son los elementos de matriz de transición que describen el proceso de fotoemitir un estado de baja energía $|\phi_\alpha\rangle$ a un estado de alta energía caracterizado por su vector de onda \mathbf{k} . En la aproximación dipolar del hamiltoniano de interacción de la radiación, estos elementos toman la forma $\langle f | \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} | \phi_\alpha \rangle$, donde \mathbf{A} es el potencial vector asociado al pulso de sondeo. El estado final se describe como $|f\rangle = a_{\mathbf{k}}^\dagger |0\rangle$, asumiendo que la interacción coulombiana entre el fotoelectrón y el sistema de baja energía se puede despreciar.

La probabilidad $P_{\mathbf{k}}(t)$ de detectar un fotoelectrón con impulso \mathbf{k} a tiempo t está dada por el valor de expectación del proyector $\Pi(\mathbf{k}) = \sum |f\rangle \langle f|$ en el subespacio de estados finales:

$$P_{\mathbf{k}}(t) = \langle \Pi(\mathbf{k}) \rangle_{\rho(t)} = \text{tr}[\rho(t) \Pi(\mathbf{k})]. \quad (3.6)$$

Usando la Ec. (3.2), el espectro de fotoemisión dependiente del tiempo se puede describir como

$$P_{\mathbf{k}}(t) = \sum_m |\langle 0 | a_{\mathbf{k}} | \Psi_m(t) \rangle|^2. \quad (3.7)$$

Se debe encontrar, por tanto, la dependencia temporal de los estados $|\Psi_m(t)\rangle$ en presencia del pulso de sondeo $\mathcal{W}(t)$ para tiempos $t > t_0$. Se tiene que

$$|\Psi_m(t)\rangle = \mathcal{U}_{tot}(t, -\infty) |\Psi_m\rangle, \quad (3.8)$$

donde

$$\mathcal{U}_{tot}(t, t') = \mathcal{T} \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t (\mathcal{H}(\tau) + \mathcal{W}(\tau)) d\tau \right). \quad (3.9)$$

Tomando como hipótesis que el pulso de *probe* es lo suficientemente débil se puede tratar la evolución temporal perturbativamente en esta interacción. Para ello, se introduce la matriz S:

$$S(t, -\infty) = \mathcal{U}(-\infty, t) \mathcal{U}_{tot}(t, -\infty). \quad (3.10)$$

Tomando la derivada temporal de $S(t, -\infty)$ se obtiene que

$$i\hbar \frac{d}{dt} S(t, -\infty) = \mathcal{U}(-\infty, t) \mathcal{W}(t) \mathcal{U}_{tot}(t, -\infty). \quad (3.11)$$

La integración de (3.11) lleva a una expresión de la forma

$$S(t, -\infty) = \mathbf{1} - i\hbar \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{U}(-\infty, t') \mathcal{W}(t') \mathcal{U}_{tot}(t', -\infty). \quad (3.12)$$

Si se toma en cuenta sólo el término de primer orden en la interacción del pulso de sondeo $\mathcal{W}(t)$ se puede reemplazar directamente $\mathcal{U}_{tot}(t', -\infty)$ por $\mathcal{U}(t', -\infty)$ del lado derecho de la ecuación (3.12). Se encuentra luego que

$$|\Psi_m(t)\rangle \approx \mathcal{U}(t, -\infty) \left(\mathbf{1} - i\hbar \int_{-\infty}^t dt' \mathcal{U}(-\infty, t') \mathcal{W}(t') \mathcal{U}(t', -\infty) \right) |\Psi_m\rangle. \quad (3.13)$$

Insertando este resultado en la Ec. (3.7) y teniendo en cuenta que $\mathcal{W}(t) = 0$ para $t < t_0$ se obtiene que

$$P_{\mathbf{k}}(t) = \sum_m f(E_m) \left| \langle 0 | a_{\mathbf{k}} \int_{t_0}^t dt' \mathcal{U}(t, t') \mathcal{W}(t') \mathcal{U}(t', -\infty) |\Psi_m\rangle \right|^2, \quad (3.14)$$

donde se asumió que $a_{\mathbf{k}} |\Psi_m\rangle \approx 0$. Una vez fotoemitido, el electrón prosigue con la evolución usual dada por su dispersión $\varepsilon(\mathbf{k})$, por tanto

$$\langle 0 | a_{\mathbf{k}} \mathcal{U}(t, t') = \langle 0 | a_{\mathbf{k}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon(\mathbf{k})(t-t')}. \quad (3.15)$$

Más aún, haciendo uso de la Ec. (3.5),

$$a_{\mathbf{k}} \mathcal{W}(t') \mathcal{U}(t', -\infty) |\Psi_m\rangle = \mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t') \sum_{\alpha} M_{\mathbf{k}\alpha} c_{\alpha} \mathcal{U}(t', -\infty) |\Psi_m\rangle. \quad (3.16)$$

Finalmente, se obtiene como expresión final para la fotoemisión resuelta en tiempo:

$$P_{\mathbf{k}}(t) = \sum_m f(E_m) \left| \sum_{\alpha} \int_{t_0}^t M_{\mathbf{k}\alpha} e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon(\mathbf{k})t'} \mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t') \langle 0 | c_{\alpha} \mathcal{U}(t', -\infty) |\Psi_m\rangle dt' \right|^2. \quad (3.17)$$

La función de onda evolucionada en el tiempo se puede expresar en la base correspondiente a los autoestados del hamiltoniano sin perturbar \mathcal{H}_0 ,

$$\mathcal{U}(t, -\infty) |\Psi_m\rangle = |\Psi_m(t)\rangle = \sum_{\beta} \eta_{m\beta}(t) c_{\beta}^{\dagger} |0\rangle, \quad (3.18)$$

donde $\eta_{m\beta}(t) = \langle 0 | c_{\beta} |\Psi_m(t)\rangle$. Introduciendo esta expresión en la Ec. (3.17) se obtiene

que

$$P_{\mathbf{k}}(t) = \sum_m f(E_m) \left| \sum_{\alpha} \int_{t_0}^t M_{\mathbf{k}\alpha} e^{\frac{i}{\hbar} \varepsilon(\mathbf{k}) t'} \mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t') \eta_{m\alpha}(t') dt' \right|^2. \quad (3.19)$$

Notar que si los operadores fermiónicos c_{α} describen la ocupación de los autoestados no perturbados del sistema, en el caso donde la excitación externa sea nula $\eta_{m\alpha}(t) = e^{-iE_m t} \delta_{m\alpha}$. La probabilidad de fotoemisión del sistema en equilibrio adquiere entonces una forma sencilla:

$$P_{\mathbf{k}}(t) = \sum_m f(E_m) \left| M_{\mathbf{k}m} \right|^2 \left| \int_{t_0}^t e^{\frac{i}{\hbar} [\varepsilon(\mathbf{k}) - E_m] t'} \mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t') dt' \right|^2. \quad (3.20)$$

Si el perfil del pulso de sondeo $\mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t)$ es lo suficientemente ancho, el espectro de fotoemisión indicará con claridad el espectro de autoenergías del sistema en equilibrio. El número de fotoelectrones emitidos con cierto impulso \mathbf{k} y cierta energía $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ estará determinado por las reglas de selección del acomplamiento radiación - electrón dadas por los elementos de matriz dipolares $M_{\mathbf{k}m}$.

Para comprender qué información se obtiene del estado fuera de equilibrio, es posible modelar las autofunciones del hamiltoniano dependiente del tiempo $|\Psi_m(t)\rangle$ a través de las ya conocidas autofunciones de Floquet. Si asumimos que esta perspectiva es válida alrededor del centro de un pulso de excitación suficientemente ancho, donde las variaciones del perfil de pump son pequeñas:

$$|\Psi_{\pm}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_{\pm} t} \sum_n e^{in\Omega t} |u_n^{\pm}\rangle. \quad (3.21)$$

Reemplazando en la Ec. (3.17), se evidencia la existencia de cierta probabilidad de fotoemisión en energías que revelan el espectro de Floquet:

$$P_{\mathbf{k}}(t) = \sum_{m=\pm} f(E_m) \left| \sum_{\alpha, n=-\infty}^{n=\infty} \int_{t_0}^t M_{\mathbf{k}\alpha} e^{\frac{i}{\hbar} [\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_m + n\hbar\Omega] t'} \mathcal{S}_{\mathcal{W}}(t') \langle 0 | c_{\alpha} | u_n^m \rangle dt' \right|^2. \quad (3.22)$$

Se comprende entonces que los espectros de fotoemisión resuelta en tiempo permiten obtener información del sistema dinámico, como se ha encontrado recientemente en la superficie de un aislante topológico [7]. La intensidad de las réplicas de orden superior será pesada tanto por los elementos de matriz dipolares como por $\langle 0 | c_{\alpha} | u_n^m \rangle$, donde este último término es aquel que para el régimen de acoplamiento débil será pequeño para $|n| > 0$. A medida que la amplitud del campo de excitación crece se espera que la intensidad de las réplicas de orden superior también lo haga.

3.1. Tr-ARPES en una monocapa de grafeno.

Como primer ejemplo de aplicación, se estudiará la forma que adquiere el espectro de fotoemisión determinado por la Ec. (3.17) en el caso del grafeno irradiado. Como se ha visto en la Sección 2.4, se puede describir al hamiltoniano dependiente del tiempo a través de la sustitución de Peierls, obteniendo para cada estado electrónico caracterizado por su cuasi-impulso cristalino \mathbf{k} un $\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(t)$ dado por la Ec. (2.22). En este caso, el potencial vector $\mathbf{A}(t) = \Re[\mathbf{A}_0(t)e^{i\Omega t}]$, donde $\mathbf{A}_0(t)$ define el perfil temporal del pulso de pump. El operador evolución para cada estado electrónico \mathbf{k} tomará la forma dada por la Ec. (3.4),

$$\mathcal{U}_{\mathbf{k}\xi}(t, t_i) = \mathcal{T} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^t v_f \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t') dt'} \right], \quad (3.23)$$

donde $\boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t) = \left(\xi[\hbar k_x + eA_x(t)], \hbar k_y + eA_y(t) \right)$ es el momento canónico conjugado del sistema irradiado. Discretizando la integral del exponente,

$$\mathcal{U}_{\mathbf{k}\xi}(t, t_i) = \mathcal{T} \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \sum_{n=1}^N v_f \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n) \delta t} \right] \approx \mathcal{T} \left[\prod_n e^{-\frac{i}{\hbar} v_f \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n) \delta t} \right], \quad (3.24)$$

donde $t_n = t_i + \frac{2n-1}{2} \delta t$ y se asume en la aproximación que el intervalo δt es lo suficientemente pequeño para permitir la validez de $[\mathcal{H}_{\mathbf{k}}(t_n), \mathcal{H}_{\mathbf{k}}(t_n + \delta t)] \approx 0$. Desarrollando la exponencial y teniendo en cuenta las propiedades de las matrices de Pauli, *i.e.* $[\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n)]^{2n} = \mathbf{1}$ y $[\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n)]^{2n+1} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n)$, es posible obtener como expresión para el operador evolución

$$\mathcal{U}_{\mathbf{k}\xi}(t, t_i) = \mathcal{T} \left[\prod_n \left\{ \cos \left(v_f |\boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n)| \frac{\delta t}{\hbar} \right) \mathbf{1} - i \sin \left(v_f |\boldsymbol{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n)| \frac{\delta t}{\hbar} \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n) \right\} \right]. \quad (3.25)$$

Por otro lado, el modelo de los elementos de matriz $M_{\mathbf{k}\alpha}$ utilizado ya ha sido previamente estudiado por Y. Liu *et al* [26]. Considerando los autoestados del hamiltoniano sin perturbar alrededor de los conos \mathbf{K}_ξ ,

$$|\Psi_{\mathbf{k}\pm}^\xi\rangle = |\mathbf{k}A\rangle \pm \xi e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} |\mathbf{k}B\rangle, \quad (3.26)$$

los elementos de matriz $M_{\mathbf{k}\pm}^\xi = \langle f | \mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{p} | \Psi_{\mathbf{k}\pm}^\xi \rangle$ estarán determinados por el acoplamiento $\zeta_x = \langle f | p_x | \mathbf{k}A \rangle = \langle f | p_x | \mathbf{k}B \rangle$ y $\zeta_y = \langle f | p_y | \mathbf{k}A \rangle = -\langle f | p_y | \mathbf{k}B \rangle$, donde los signos se encuentran dados por la simetría indicada en la Fig. 2.1. Considerando que $\mathbf{A}(t) = A_0(t)[\cos(\chi)\hat{x} - i\sin(\chi)\hat{y}]$, los elementos de matriz resultantes se expresan como

$$M_{\mathbf{k}\pm}^\xi = A_0 \left[\cos(\chi) \zeta_x (1 \mp \xi e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}}) - i \sin(\chi) \zeta_y (1 \pm \xi e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}}) \right]. \quad (3.27)$$

Para energías de probe suficientemente grandes (> 30 eV), se encontró experimentalmente que $\zeta_x \sim \zeta_y$. En el caso del sistema en equilibrio, la intensidad del espectro

de fotoemisión estará dada por $|M_{\mathbf{k}\pm}^\xi|^2$, por lo visto en la Ec. (3.20), generando cierta funcionalidad en las intensidades de fotoemisión, determinadas por

$$I_\pm^\xi \propto |M_{\mathbf{k}\alpha}^\xi|^2 \propto 1 \pm \xi \cos(\xi\theta_{\mathbf{k}} + 2\chi). \quad (3.28)$$

Se entiende que midiendo espectros de ARPES en equilibrio es posible por tanto obtener las fases electrónicas de las funciones de onda variando la polarización χ del pulso de sondeo.

3.1.1. Fotoemisión en grafeno en equilibrio.

Con el fin de comprender el rol de los elementos de matriz $M_{\mathbf{k}\alpha}$, correspondientes al acoplamiento dipolar del sistema electrónico con la radiación [ver Ec. (3.27)], se analizarán en primera instancia los espectros de fotoemisión obtenidos en el equilibrio (es decir, sin irradiación). En la Fig. 3.2 se muestran cortes en el plano $k_x = 0$, obtenidos con pulsos de sondeo de distinto ancho temporal $\delta\tau$ y con polarización lineal en \hat{x} . Se observan las bandas del grafeno alrededor del cono \mathbf{K} con una modulación de intensidad dada por la función de ocupación de Fermi con un potencial químico $\mu = 100$ meV y $T = 300$ K. Nótese que a medida que el pulso de probe se hace más angosto temporalmente, se pierde resolución espectral ($\delta E \sim \frac{\hbar}{\delta\tau}$).

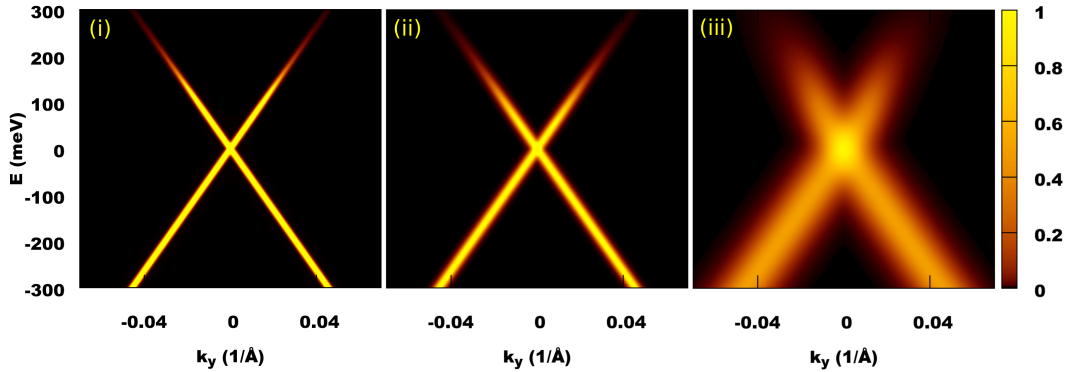


Figura 3.2: Espectros de fotoemisión del grafeno sin irradiar alrededor del cono \mathbf{K} para distintos anchos temporales del pulso de sondeo. (i) $\delta\tau = 100$ fs, (ii) $\delta\tau = 50$ fs, (iii) $\delta\tau = 20$ fs.

En la Fig. 3.3 se muestran cortes a energías constantes (-60 meV y 60 meV) en el cono \mathbf{K} variando la polarización χ del pulso de probe. Los espectros obtenidos indican una intensificación y anulación de la probabilidad de fotoemisión en distintas direcciones, producto de la influencia de los elementos de matriz dipolares [ver Ec. (3.28)]. Este efecto de dicroísmo circular es ya bien conocido en la literatura [26, 40, 41]. La fase π existente entre la parte superior e inferior del cono de Dirac pone de manifiesto la distinta quiralidad del pseudo-espín. Un análisis de la intensidad medida en función del ángulo $\theta_{\mathbf{k}}$ permite obtener la fase de Berry de este sistema.

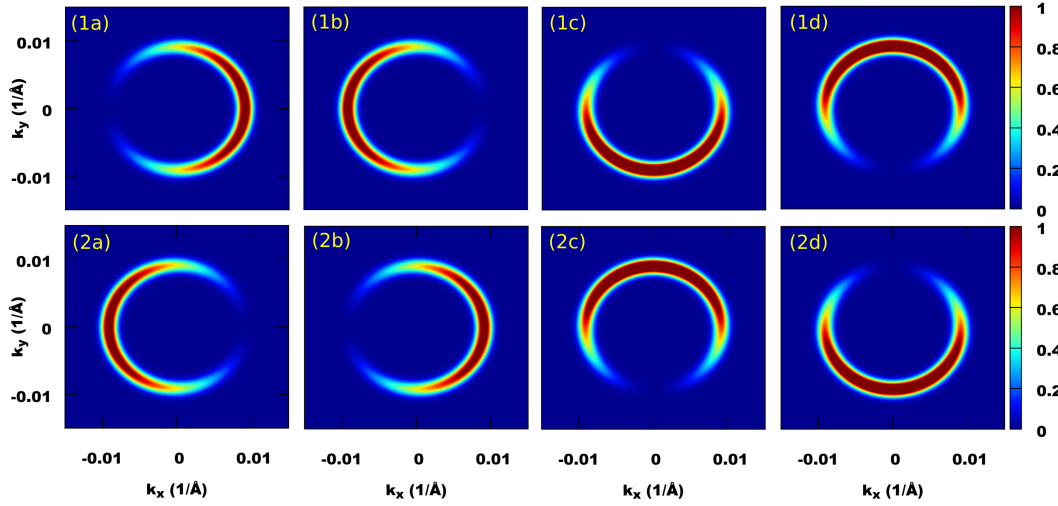


Figura 3.3: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión normalizada a energías constantes (1) $E_0 = \frac{\hbar\Omega}{2} = 60$ meV y (2) $E_0 = -\frac{\hbar\Omega}{2} = -60$ meV en el cono \mathbf{K} . El pulso de probe se encuentra polarizado en las direcciones definidas por (a) $\chi = 0$ (lineal en \hat{x}), (b) $\chi = \frac{\pi}{2}$ (lineal en \hat{y}), (c) $\chi = \frac{\pi}{4}$ (circular en sentido horario) y (d) $\chi = \frac{7\pi}{4}$ (circular en sentido anti-horario).

3.1.2. Fotoemisión en grafeno irradiado.

Conocida la función de onda a todo tiempo a través del cálculo numérico del propagador y sus respectivas proyecciones en las bandas originales del grafeno, es posible obtener los espectros de fotoemisión del sistema fuera de equilibrio.

En la Fig. 3.4 se presentan simulaciones obtenidas para el grafeno irradiado con un pulso de pump gaussiano de un ancho temporal de $\Delta t \sim 400$ fs variando la amplitud pico (A_0) del potencial vector. Se utilizó un pulso de pump con una energía $\hbar\Omega = 120$ meV y un pulso de probe con polarización lineal en \hat{x} y del mismo ancho temporal que el pulso de excitación para una adecuada visualización de los espectros.

Es posible observar que la estructura de bandas que se obtiene con los espectros de tr-ARPES muestra una dispersión de cuasi-energías de Floquet bien definida. El potencial químico μ fue fijado con un valor superior a los 300 meV para una mejor visualización del espectro. En los casos donde la excitación incidente posee polarización circular [Figs. 3.4(b), (c) y (d)] se observa la aparición de gaps dinámicos en estas escalas temporales. A medida que la amplitud de la radiación aumenta los mismos crecen, pasando a un régimen de acoplamiento fuerte en donde, por ejemplo, el gap de $k = 0$ se hace del mismo orden que el de $k_0 = \frac{\Omega}{2v_f}$. Por otro lado, incrementa tanto la intensidad como el número de réplicas posibles de detectar debido a que en la función de onda del sistema electrónico se hacen más importantes las proyecciones en estados de más fotones.

Si la luz es linealmente polarizada [Fig. 3.4(a)], si bien se vislumbran las réplicas de Floquet, no hay presencia de gaps en el espectro en la dirección colineal con la polarización como se espera por la forma de la matriz de mezcla entre réplicas [ver

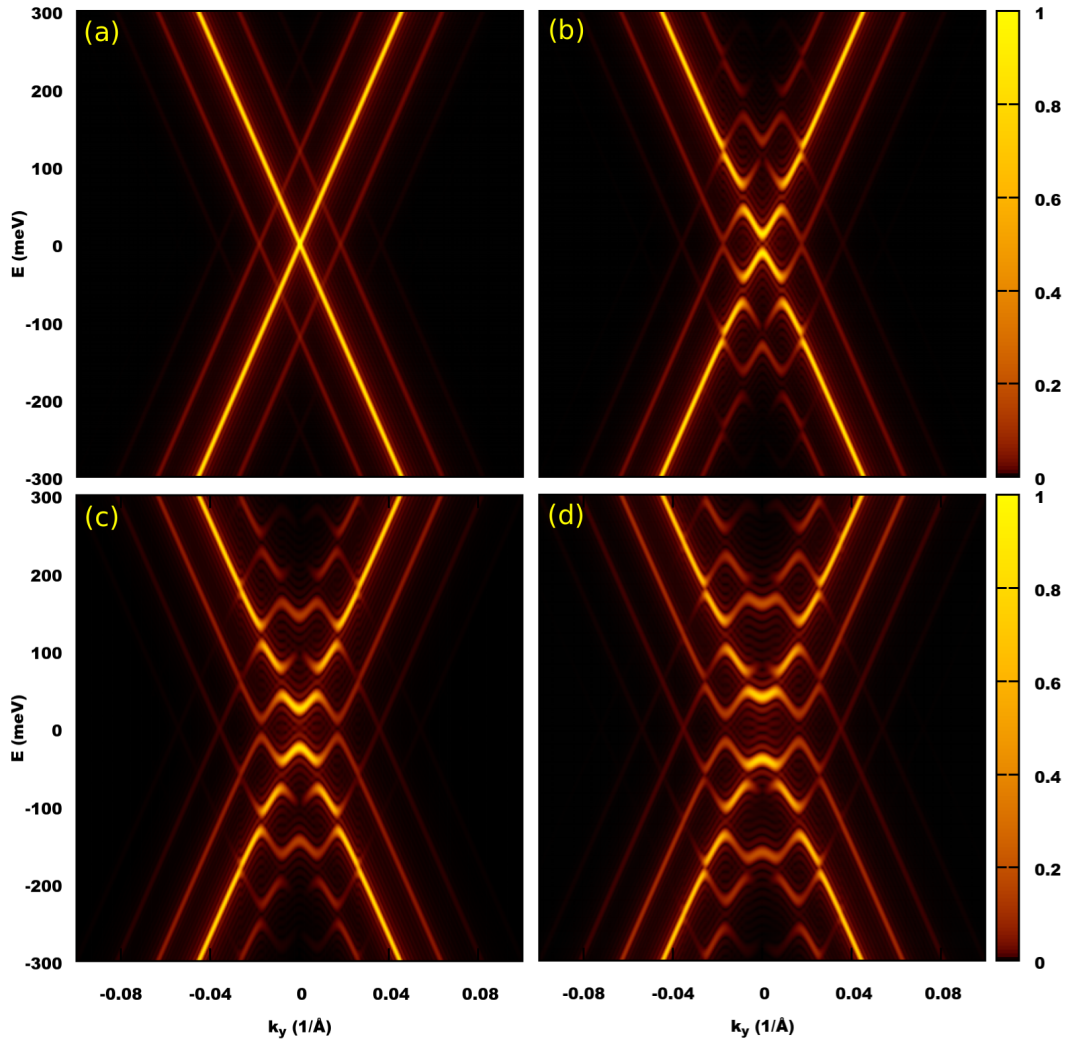


Figura 3.4: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión normalizada en función del cuasi-impulso cristalino k_y y de la energía del electrón fotoemitido para un pulso de pump con $\hbar\Omega = 120$ meV. (a) Pulso de excitación con polarización lineal. (b),(c) y (d) Pulso de excitación con polarización circular con $ev_f A_0 = 40$ meV, $ev_f A_0 = 60$ meV y $ev_f A_0 = 80$ meV, respectivamente.

Ec. (2.31)]. Este fenómeno se evidencia también en la Fig. 3.5, donde se muestra el espectro de fotoemisión en un corte a energía constante $E = \frac{\hbar\Omega}{2} = 60$ meV. En el caso de polarización circular se espera que para este valor de energía no exista probabilidad de fotoemisión en ninguna dirección, pues aparece un gap de forma isotrópica. Ahora bien, si el pulso de pump se encuentra polarizado en \hat{y} , aparecen gaps únicamente en la dirección ortogonal [Figs. 3.5(a) y (b)]. En el caso de una excitación polarizada en \hat{x} [Figs. 3.5 (c) y (d)] sólo hay probabilidad de fotoemisión en esta dirección. Nótese que este efecto, propio de la función de onda electrónica del sistema perturbado, se encuentra superpuesto al del dicroísmo generado por la polarización del probe. En los casos de las Figs. [3.5(b) y 3.5(c)] la dependencia de la intensidad del espectro inducida por los elementos de matriz dipolares produce incluso la anulación de la probabilidad de fotoemisión en regiones donde no hay gaps.

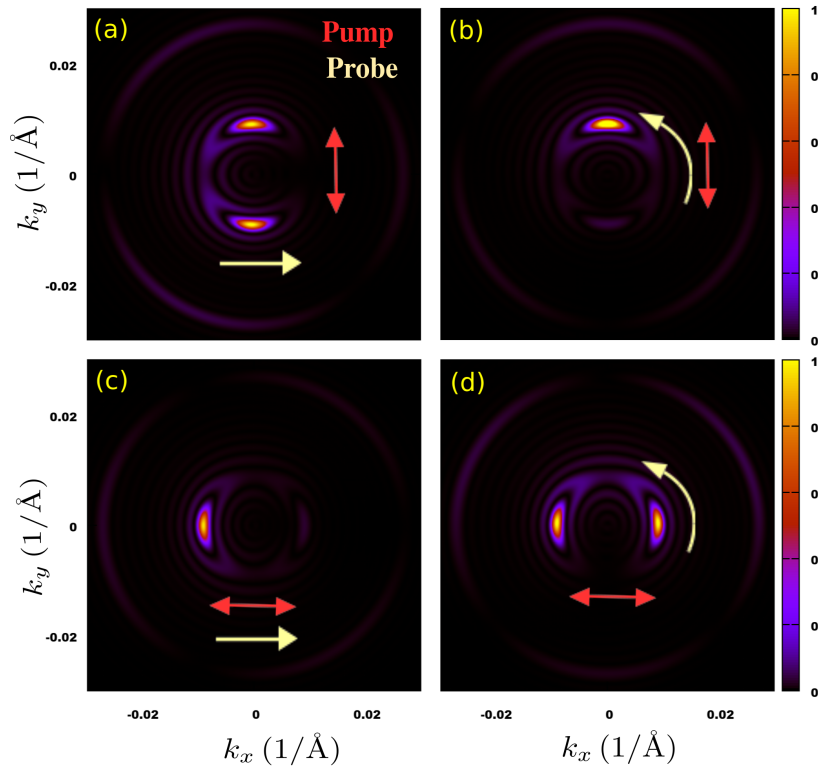


Figura 3.5: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión normalizada a energía constante $E = \frac{\hbar\Omega}{2} = 60 \text{ meV}$. (a) y (b) Pulso de pump polarizado en \hat{y} con pulso de sondeo con elipticidad dada por $\chi = \frac{\pi}{2}$ y $\chi = \frac{7\pi}{4}$, respectivamente. (c) y (d) Pulso de pump polarizado en \hat{x} con pulso de sondeo con elipticidad dada por $\chi = \frac{\pi}{2}$ y $\chi = \frac{7\pi}{4}$ respectivamente. Las flechas indican el sentido de polarización de ambos pulsos.

En todos los casos, las oscilaciones de intensidad que acompañan a las réplicas son efectos de la integración temporal en un ancho finito de pulso de sondeo.

3.2. Tr-ARPES en una monocapa de grafeno con un término de masa.

Como se introdujo en la Sección 2.4, una red hexagonal con diferentes energías de sitio produce la aparición de un término de masa en el hamiltoniano de Dirac. Este sistema presenta una transición de fase topológica para un campo de radiación que supere cierto valor crítico. Una de las preguntas a resolver en este trabajo es si efectivamente esta transición puede ser medida a través de espectroscopías de tr-ARPES. En este caso, el propagador temporal adquiere también una forma explícita en términos de las matrices de Pauli,

$$\mathcal{U}_{\mathbf{k}\xi}^{\Delta}(t, t_i) = \mathcal{T} \left[\prod_n \left\{ \cos \left(|\mathbf{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n)| \frac{\delta t}{\hbar} \right) \mathbf{1} - i \sin \left(|\mathbf{\Pi}_{\mathbf{k}\xi}(t_n)| \frac{\delta t}{\hbar} \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{\Pi}}_{\mathbf{k}\xi}(t_n) \right\} \right], \quad (3.29)$$

donde ahora $\mathbf{\Pi}_{\mathbf{k}\xi} = (\xi v_f(\hbar k_x + eA_x), v_f(\hbar k_y + eA_y), \Delta)$. Teniendo en cuenta que los autoestados del hamiltoniano no perturbado alrededor de los conos \mathbf{K}_ξ están dados por la Ec. (2.44) es posible calcular los elementos de matriz dipolares $M_{\mathbf{k}\pm}^\xi$:

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}+}^\xi &\propto \cos(\chi) \left\{ \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) + \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} \right\} - i \sin(\chi) \lambda e^{i\beta} \left\{ \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) - \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} \right\} \\ M_{\mathbf{k}-}^\xi &\propto \cos(\chi) \left\{ \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) - \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} \right\} - i \sin(\chi) \lambda e^{i\beta} \left\{ \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) + \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}\xi}}{2}\right) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} \right\}, \end{aligned} \quad (3.30)$$

donde el cociente $\frac{\zeta_y}{\zeta_x} = \lambda e^{i\beta}$ es propio del acoplamiento de los orbitales p_z del sistema en estudio con la radiación. En la Fig. 3.6 se muestran los valores experimentales tomados de la Ref. [26] para la fase β en función de la energía del pulso de probe. Nótese que para energías suficientemente bajas se acerca un valor de $\beta \simeq \frac{\pi}{2}$ y para energías altas tiende a anularse.

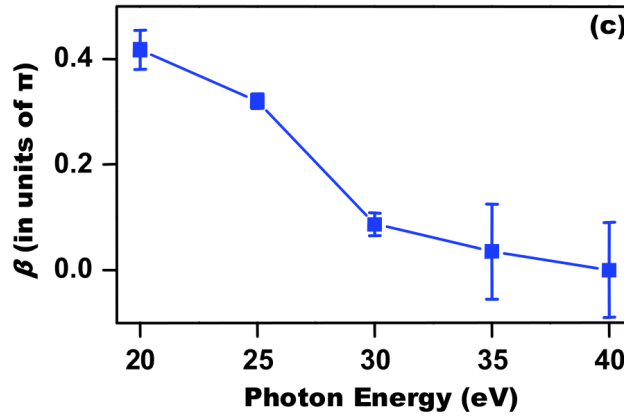


Figura 3.6: Valores experimentales tomados de la Ref. [26] para la fase β en función de la energía del pulso de probe expresados en unidades de π .

El espectro sin perturbar está caracterizado por intensidades de banda determinadas por

$$\begin{aligned} I_{\pm} \propto |M_{\mathbf{k}\pm}^\xi|^2 = \cos^2(\chi) + \lambda^2 \sin^2(\chi) \pm \left\{ \sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}) \cos(\theta_{\mathbf{k}}) [\cos^2(\chi) - \lambda^2 \sin^2(\chi)] \right. \\ \left. + \lambda \sin(2\chi) [\sin(\beta) \cos(\phi_{\mathbf{k}\xi}) - \cos(\beta) \sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}) \sin(\xi\theta_{\mathbf{k}})] \right\}, \end{aligned} \quad (3.31)$$

donde $\cos(\phi_{\mathbf{k}\xi}) = \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\hbar v_f k)^2}}$ y $\sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}) = \frac{\xi \hbar v_f |\mathbf{k}|}{\sqrt{\Delta^2 + (\hbar v_f k)^2}}$. El caso particular de $\beta = 0$, $\lambda = 1$ (energías de pulso de sondeo suficientemente altas), las intensidades del espectro

de fotoemisión son tales que

$$I_{\pm}(\beta = 0, \lambda = 1) \propto 1 \pm \sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}) \cos(\theta_{\mathbf{k}} + \xi 2\chi) = 1 \pm \sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}) \cos(\theta_{\mathbf{k}} + \xi 2\chi), \quad (3.32)$$

con dependencia cuadrática en los términos de masa, imposibilitando la detección de cambios de signo en la misma, relevantes para determinar la topología del estado [ver Ec. (2.45)]. Sin embargo, para polarizaciones de pulso de sondeo con cierta elipticidad es posible detectar cambios de signo en la fase de las funciones de onda de Bloch $\theta_{\mathbf{k}}$. Por otro lado, si las energías de probe son menores, la fase $\beta \simeq \frac{\pi}{2}$ y por tanto, el espectro adquiere un patrón dado por

$$I_{\pm}(\beta = \frac{\pi}{2}, \lambda = 1) \propto 1 \pm \left(\sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}) \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \cos(2\chi) + \sin(2\chi) \cos(\phi_{\mathbf{k}\xi}) \right). \quad (3.33)$$

Utilizando un pulso de sondeo con polarización circular (*i.e.* $\chi = \frac{\pi}{4}$) adquiere la forma sencilla

$$I_{\pm} \propto 1 \pm \cos(\phi_{\mathbf{k}\xi}) = 1 \pm \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 + (\hbar v_f k)^2}}. \quad (3.34)$$

Se comprende que un cambio de signo o magnitud en la masa Δ refleja una correspondiente variación en la intensidad del espectro de fotoemisión.

Los espectros de fotoemisión calculados en la dirección del cuasi-impulso cristalino k_y para este hamiltoniano se muestran en la Fig 3.7. En este caso se utilizó un pulso de pump gaussiano con un ancho temporal de ~ 250 fs y el de probe con ~ 100 fs centrado en el pulso de excitación. El valor de la masa fue fijado en $\Delta = 50$ meV y el potencial químico utilizado fue de $\mu = 200$ meV. Se consideró en este caso una fase $\beta = 0$ en los elementos de matriz dipolares y una energía del pulso de excitación de $\hbar\Omega = 400$ meV.

Cabe destacar que a medida que aumenta la amplitud del campo las réplicas se hacen más relevantes, existiendo una probabilidad de fotoemisión no nula para energías $E > \mu$. Este efecto es debido a que las funciones de onda de estados ocupados caracterizados por \mathbf{k} evolucionan con proyecciones no nulas en réplicas de orden superior, reflejándose como resultado en una dada intensidad en el espectro. Se puede observar también que, a medida que aumenta la amplitud del campo de radiación aplicado, el gap alrededor del cono \mathbf{K} comienza a cerrarse, hasta que en un valor de campo crítico A_{0c} [Fig. 3.7(c)] se anula volviendo a crecer para magnitudes de excitación mayores, condicionándose con la Ec. (2.45).

En la Fig. 3.8 se muestran cortes a energía constante $E = -100$ meV tanto en el cuasi-impulso \mathbf{K} como en el \mathbf{K}' para distintas amplitudes de radiación y con polarización circular ($\chi = \frac{\pi}{4}$). A un lado y a otro de la transición de fase esperada para A_{0c} el patrón de intensidades tiene la misma funcionalidad en $\theta_{\mathbf{k}}$, indicando que efectivamente no hay cambios de fase en la función de onda. En el caso del cuasi-impulso \mathbf{K}' se nota

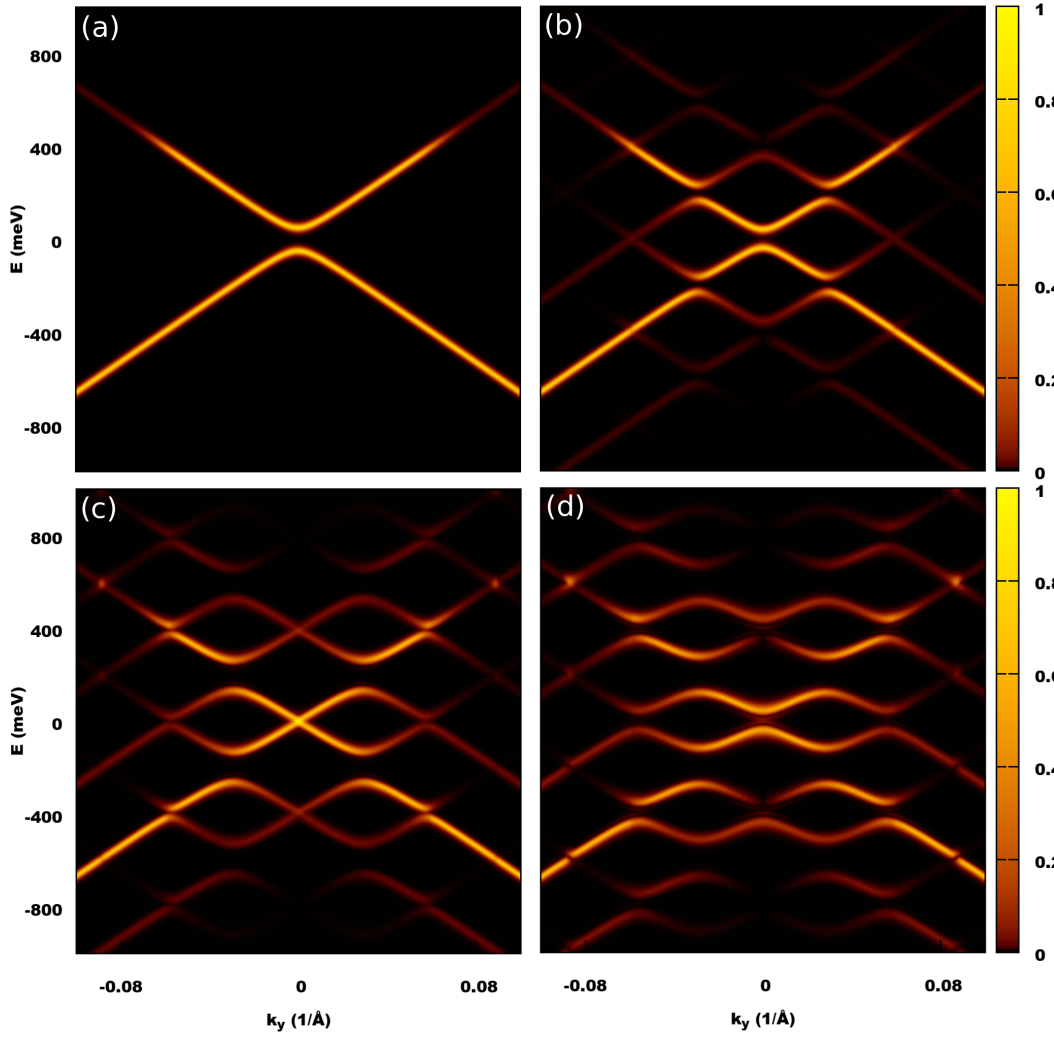


Figura 3.7: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión en grafeno con masa $\Delta = 50$ meV en función del cuasi-impulso cristalino k_y para distintas amplitudes de campo en el cono \mathbf{K} : (a) $A_0 = 0$ eV, (b) $A_0 = 60$ meV, (c) $A_0 = 130$ meV y (d) $A_0 = 200$ meV.

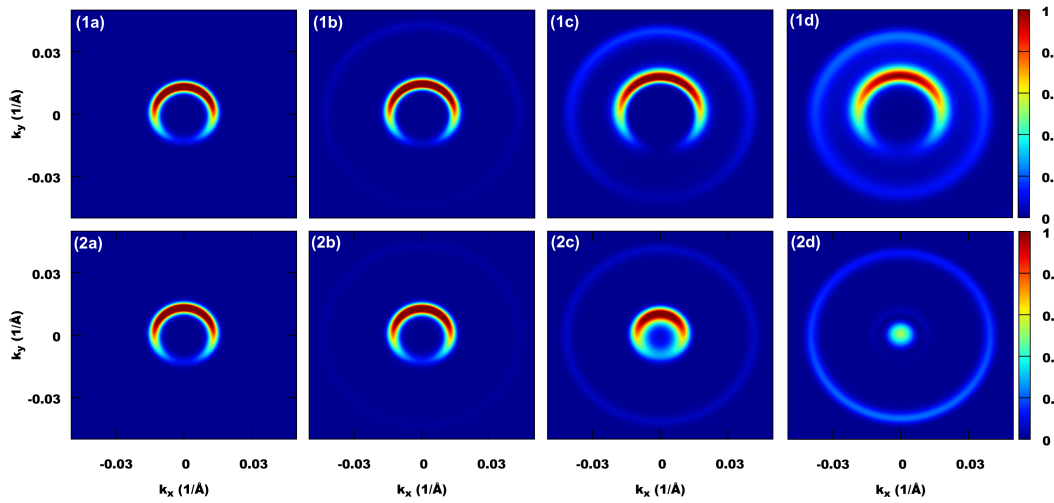


Figura 3.8: Probabilidad de fotoemisión en grafeno con masa $\Delta = 50$ meV a energía constante $E = -100$ meV para distintas amplitudes de campo en los cuasi-impulsos \mathbf{K} (1) y \mathbf{K}' (2): (a) $A_0 = 0$ eV, (b) $A_0 = 60$ meV, (c) $A_0 = 130$ meV y (d) $A_0 = 200$ meV.

siempre una disminución del diámetro del corte observado, pues el gap en esta zona aumenta. Se comprende luego que, en el límite de energías de probe lo suficientemente altas, no se observan asimetrías en el espectro de energías en función del cuasi-impulso cristalino ni en los cortes a energía constante en las distintas fases, imposibilitando la detección de la transición topológica.

En el límite opuesto, correspondiente a energías de pulso de sondeo suficientemente bajas ($\beta \simeq \frac{\pi}{2}$), no hay dependencia angular en el espectro al realizar cortes a energía constante con una polarización de probe circular, sin embargo sí existe una cierta funcionalidad de la intensidad en la dispersión $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ para distintos valores de cuasi-impulso cristalino. En la Fig. 3.9(a) se muestran espectros de fotoemisión obtenidos con distintas amplitudes de pulso de pump tanto en el cono \mathbf{K} como en el \mathbf{K}' . Nótese que en este último el gap siempre aumenta, manteniendo la relación de intensidades. Por otro lado, en el cono \mathbf{K} al cerrarse el gap [Fig. 3.9 (II.c)] se invierte esta funcionalidad. Este efecto se puede entender a partir de los elementos de matriz calculados en el equilibrio [ver Ec. (3.34)], ya que en el estado dinámico únicamente ocurre una renormalización del término de masa al orden más bajo en perturbaciones. Según el formalismo de Floquet, en ese orden de aproximación, se espera que para $A_{0c} = 132 \text{ meV}$ el valor de $\tilde{\Delta}_{\mathbf{K}}$ se haga nulo y que por encima de este campo el sistema se vuelva topológicamente no trivial. Se observa en los espectros de fotoemisión que para una magnitud de campo aplicado de $A_0 = 130 \text{ meV}$ el gap se cierra, indicando que el valor de campo crítico es menor que el calculado con perturbaciones. Este resultado es esperable, ya que la contribución de réplicas de orden superior hace que la brecha prohibida sea menor que teniendo en cuenta únicamente las réplicas que difieren de la original en $|\Delta n| = 1$.

Con el fin de visualizar con claridad esta diferencia de fases topológicas, se muestra en la Fig. 3.9(b) la probabilidad de fotoemisión a lo largo del cuasi-impulso $k_y = 0,005 \text{ 1/\AA}$ en función de la energía y la amplitud del campo de radiación incidente para el cono \mathbf{K} y el \mathbf{K}' . Se comprende que una vez superado el campo crítico hay una transferencia neta de intensidad de fotoemisión de una banda a la otra en el cono \mathbf{K} (panel superior), producto de la aparición de una textura de pseudo-espín que difiere de la existente en la fase trivial. Por otro lado, en el cono \mathbf{K}' (panel inferior) se mantiene siempre una intensidad de fotoemisión mayor en la banda superior, debido a que no hay inversión del término de masa en el hamiltoniano. Se observa también que a medida que la amplitud del campo aplicado crece se pierde intensidad en las réplicas de interés ($n = 0$), ya que hay mayor peso de la función de onda en las réplicas de orden superior.

En la Fig. 3.10 se muestran cortes a energía constante $E_0 = 100 \text{ meV}$ en ambos valles variando la amplitud del perfil del pulso de pump. No existe dependencia angular en $\theta_{\mathbf{k}}$ debido a que se eligió una polarización de pulso de sondeo circular. Sin embargo, midiendo la relación de intensidades antes y después de la transición topológica también

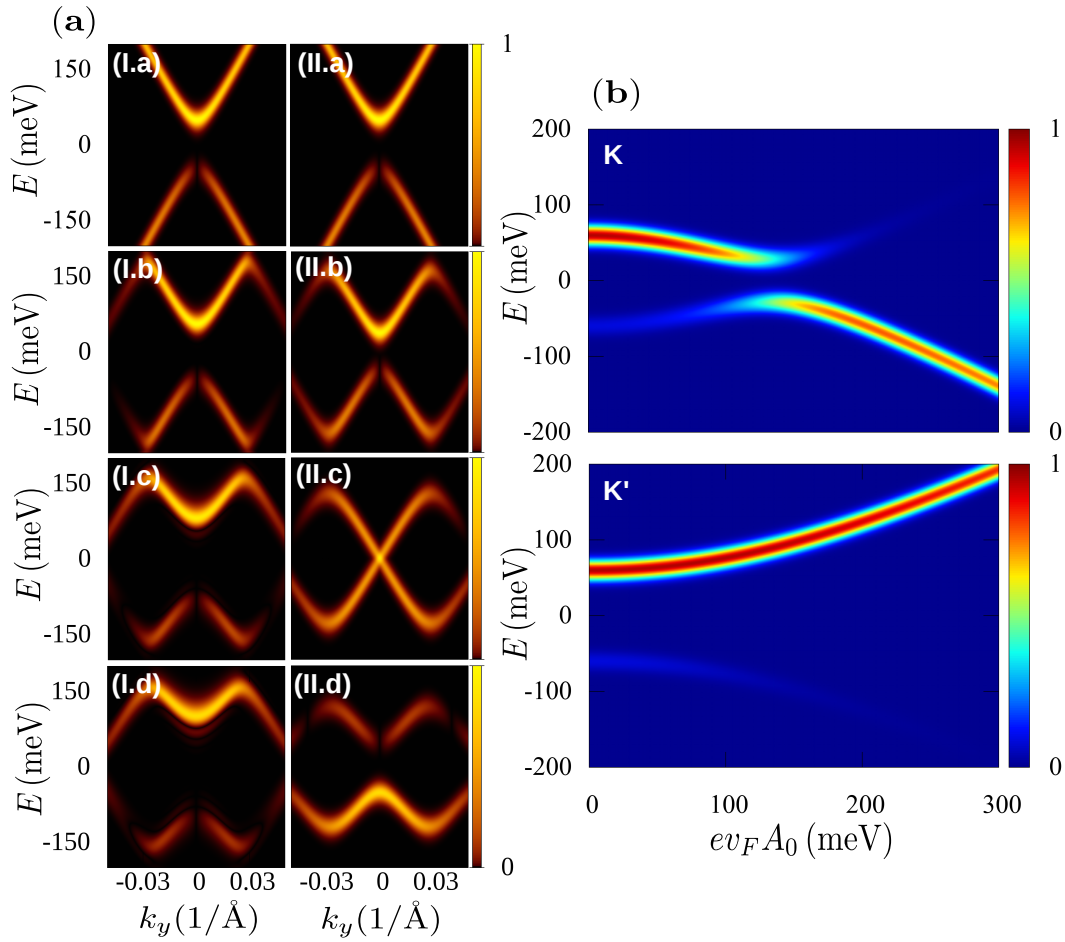


Figura 3.9: (a) Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión en función del cuasi-impulso cristalino k_y para distintas amplitudes de campo en el cono \mathbf{K}' (I) y en el cono \mathbf{K} (II) con energía de la radiación creciente de arriba hacia abajo $ev_f A_0 = 0$ eV, 60 meV, 130 meV y 200 meV. (b) Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión a lo largo de $k_y = 0,005$ 1/Å en función de la energía para el cono \mathbf{K} (panel superior) y el cono \mathbf{K}' (panel inferior variando la amplitud de la radiación incidente A_0). La energía del fotón incidente es de $\hbar\Omega = 400$ meV con polarización circular.

es posible detectarla en forma cualitativa. Se puede observar la inversión de intensidades en el cono \mathbf{K} para amplitudes de excitación mayores que la crítica [Fig. 3.10 (1d)]. Por otro lado, en el cono \mathbf{K}' el gap siempre aumenta, haciendo que se reduzca el radio del corte observado, manteniendo sin embargo intensidad máxima.

El caso límite de $\Delta = 0$ (grafeno usual) se presentaría esta misma transición topológica a campo crítico nulo $A_{0c} = 0$. Se muestra en la Fig. 3.11 este caso con parámetros experimentales realistas: el valor de la fase $\beta = 0,4\pi$, el potencial químico tanto en $\mu = 100$ meV [3.11(3a)] como en $\mu = 0$ meV [3.11(3d)] y la energía del fotón incidente de $\hbar\Omega = 400$ meV con un probe circularmente polarizado. Estas condiciones generan un pequeño dicroísmo [Fig. 3.11(3b)] en el espectro. La intensidad de las líneas de fotoemisión correspondientes a la banda de conducción muestran un comportamiento notablemente distinto en los dos puntos de Dirac Fig. 3.11(3c). Este fenómeno indica que la curvatura de Berry \mathcal{F}_k^z posee el mismo signo en los dos valles, traduciéndose en

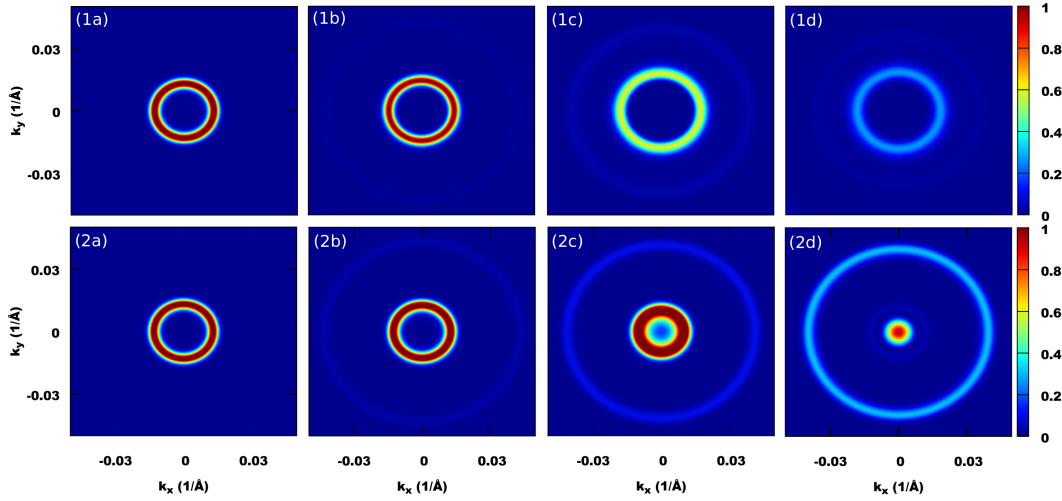


Figura 3.10: Espectros de fotoemisión a energía constante $E_0 = 100$ meV en el cono \mathbf{K} (1) y el cono \mathbf{K}' (2) para distintas amplitudes de pulso de excitación: (a) $A_0 = 0$ eV, (b) $A_0 = 60$ meV, (c) $A_0 = 130$ meV, (d) $A_0 = 200$ meV.

un Chern no trivial. Este efecto también se encuentra presente en el grafeno no dopado ($\mu = 0$ eV) como se muestra en la Fig. 3.11(3d), donde el espectro de fotoemisión se presenta a lo largo de la dirección k_x con el fin de despreciar las asimetrías debidas al microísmo generado por el haz de probe.

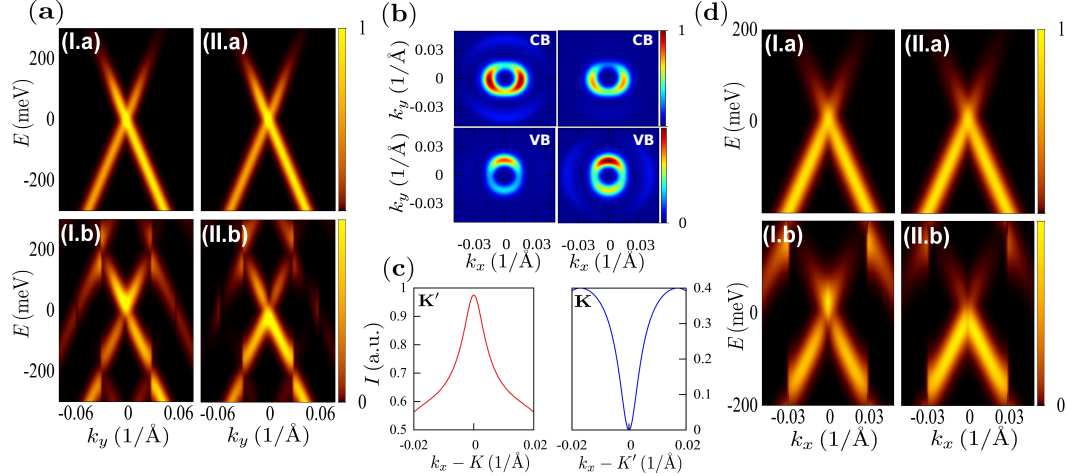


Figura 3.11: Intensidad del espectro de ARPES para el caso del grafeno ($\Delta = 0$) con una fase $\beta = 0,4\pi$ correspondiente a una energía del haz de probe de 20 eV. Tanto el pump como el probe se encuentran circularmente polarizados, el primero con un ancho temporal de 250 fs y el último de 20 fs. En todos los paneles la columna izquierda (derecha) se corresponde con el valle \mathbf{K} (\mathbf{K}'). (a) Cortes del espectro de fotoemisión a lo largo de k_y para el grafeno sin perturbar (paneles superiores) e irradiado con un pulso de pump (paneles inferiores) cercanos a los puntos de Dirac. (b) Cortes a energía constante de 100 meV (CB: banda de conducción) y -100 meV (VB: banda de valencia). (c) Intensidad de los fotoelectrones provenientes de la banda de valencia a lo largo de k_x para estados cercanos a cada valle. El máximo en \mathbf{K}' y el mínimo en \mathbf{K} indican la topología no trivial de las funciones de onda de Bloch en esta banda. (d) Cortes del espectro a lo largo de k_x con el potencial químico fijo en $\mu = 0$ eV en equilibrio (paneles superiores) y en el sistema irradiado (paneles inferiores) cercanos a los puntos de Dirac.

3.3. Tr-ARPES en una bicapa de grafeno irradiada.

Como se introdujo en la Sección 2.5, las bandas de menor energía de una bicapa de grafeno sometida a un potencial externo pueden ser descriptas en términos de matrices de Pauli

$$\tilde{H}_{\text{eff}}^B = \frac{v_f^2}{t_\perp} \left[(\Pi_{\mathbf{k}x}^2 - \Pi_{\mathbf{k}y}^2) \sigma_x + \xi 2 \Pi_{\mathbf{k}x} \Pi_{\mathbf{k}y} \sigma_y \right] + V \sigma_z, \quad (3.35)$$

donde $\Pi_{\mathbf{k}x} = \hbar k_x + eA_x$ y $\Pi_{\mathbf{k}y} = \hbar k_y + eA_y$ son las componentes del impulso dinámico al acoplarse con el campo de radiación del pump. En este caso, los autoestados del hamiltoniano no perturbado son tales que

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{k}\xi}^+\rangle &= \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) |\mathbf{k}A\rangle + \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) e^{i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} |\mathbf{k}B\rangle \\ |\Psi_{\mathbf{k}\xi}^-\rangle &= \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) |\mathbf{k}A\rangle - \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) e^{i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} |\mathbf{k}B\rangle, \end{aligned} \quad (3.36)$$

con autoenergías dadas por $\varepsilon_\pm = \pm \sqrt{V^2 + (\hbar v_f k)^4 / t_\perp^2}$, $\cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) = \frac{(\hbar v_f k)^2 / t_\perp}{\sqrt{(\hbar v_f k)^4 / t_\perp^2 + (\varepsilon_+ + V)^2}}$ y $\sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) = \frac{\varepsilon_+ + V}{\sqrt{(\hbar v_f k)^4 / t_\perp^2 + (\varepsilon_+ + V)^2}}$. Los elementos de matriz dipolares $M_{\mathbf{k}\pm}^\xi$ se expresan entonces como

$$\begin{aligned} M_{\mathbf{k}+}^\xi &\propto \cos(\chi) \left\{ \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) + \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) e^{i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} \right\} - i \sin(\chi) \lambda e^{i\beta} \left\{ \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) - \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) e^{i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} \right\} \\ M_{\mathbf{k}-}^\xi &\propto \cos(\chi) \left\{ \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) - \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) e^{i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} \right\} - i \sin(\chi) \lambda e^{i\beta} \left\{ \sin\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) + \cos\left(\frac{\phi_{\mathbf{k}}}{2}\right) e^{i\xi 2\theta_{\mathbf{k}}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Las intensidades de banda del sistema no perturbado serán similares al caso de la monocapa de grafeno con masa,

$$\begin{aligned} I_\pm \propto |M_{\mathbf{k}\pm}^\xi|^2 &= \cos^2(\chi) + \lambda^2 \sin^2(\chi) \pm \left\{ \sin(\phi_{\mathbf{k}}) \cos(2\theta_{\mathbf{k}}) [\cos^2(\chi) - \lambda^2 \sin^2(\chi)] \right. \\ &\quad \left. + \lambda \sin(2\chi) [\sin(\beta) \cos(\phi_{\mathbf{k}}) - \cos(\beta) \sin(\phi_{\mathbf{k}}) \sin(\xi 2\theta_{\mathbf{k}})] \right\}, \end{aligned} \quad (3.38)$$

donde $\cos(\phi_{\mathbf{k}}) = \frac{-V}{\sqrt{V^2 + (\hbar v_f k)^4 / t_\perp^2}}$ y $\sin(\phi_{\mathbf{k}}) = \frac{(\hbar v_f k)^2 / t_\perp}{\sqrt{V^2 + (\hbar v_f k)^4 / t_\perp^2}}$. En situación análoga al caso anterior, para $\beta \simeq 0$ y $\zeta_x \sim \zeta_y$ la forma funcional de las intensidades será tal que

$$I_\pm(\beta = 0, \lambda = 1) \propto 1 \pm \sin(\phi_{\mathbf{k}}) \cos(2\theta_{\mathbf{k}} + \xi 2\chi). \quad (3.39)$$

Notar que para un dado valor de $|\mathbf{k}|$, la probabilidad de fotoemisión presenta dos mínimos y dos máximos en función de $\theta_{\mathbf{k}}$, producto de la fase electrónica de las funciones de onda de Bloch en este modelo [ver Ec. (3.36)]. Por otro lado, si las energías del pulso de sondeo son inferiores y $\beta \simeq \frac{\pi}{2}$ es posible detectar variaciones en el potencial V midiendo el espectro de fotoemisión en función del módulo del cuasi-impulso cristalino,

ya que

$$I_{\pm} \propto 1 \mp \frac{V}{\sqrt{V^2 + (\hbar v_f k)^4 / t_{\perp}^2}}, \quad (3.40)$$

donde se tomó el caso de un pulso de probe circularmente polarizado.

Para el caso del modelo más completo que toma en cuenta las cuatro bandas de la bicapa de grafeno, se encuentra numéricamente el operador evolución a partir de una diagonalización del hamiltoniano $\mathcal{H}(t)$ instante a instante:

$$\mathcal{U}_{k\xi} = \mathcal{T} \left[\prod_n \sum_m e^{-i\varepsilon_m(t_n) \frac{\delta t}{\hbar}} |\Psi_{m\xi}(t_n)\rangle \langle \Psi_{m\xi}(t_n)| \right] = \mathcal{T} \left[\prod_n \mathbb{P}_{\xi}(t_n) \right], \quad (3.41)$$

donde se definió $\mathbb{P}_{\xi}(t_n) = \sum_m e^{-i\varepsilon_m(t_n) \frac{\delta t}{\hbar}} |\Psi_{m\xi}(t_n)\rangle \langle \Psi_{m\xi}(t_n)|$. Por otro lado, si se considera que los espinores de cuatro componentes, autoestados del hamiltoniano, se pueden describir como:

$$|\Psi_{m\xi}\rangle_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \alpha_{m\xi}^1 \\ \beta_{m\xi}^1 \\ \alpha_{m\xi}^2 \\ \beta_{m\xi}^2 \end{pmatrix}_{\mathbf{k}}, \quad (3.42)$$

manteniendo la misma convención de signos en los elementos de matriz dipolares se tiene que

$$M_{\mathbf{k}m}^{\xi} \propto \cos(\chi)(\alpha_{\xi m}^1 + \beta_{\xi m}^1 + \alpha_{\xi m}^2 + \beta_{\xi m}^2) - i \sin(\chi) \lambda e^{i\beta} (\alpha_{\xi m}^1 - \beta_{\xi m}^1 + \alpha_{\xi m}^2 - \beta_{\xi m}^2). \quad (3.43)$$

En el límite de energías de sondeo suficientemente bajas ($\beta = \frac{\pi}{2}$) y polarización circular $\chi = \frac{\pi}{4}$, tomando $\lambda = 1$ solamente se permite la fotoemisión de los sitios de las subredes \mathcal{A}_1 y \mathcal{A}_2 . Al cambiar la quiralidad de la polarización a $\chi = \frac{7\pi}{4}$ se tiene únicamente acoplamiento del campo con las subredes \mathcal{B}_1 y \mathcal{B}_2 .

En la Fig. 3.12 se muestran los espectros de fotoemisión del modelo efectivo de dos bandas en el cono \mathbf{K} obtenidos en el sistema no perturbado realizando cortes a energía constante $E = 100$ meV con distinta polarización del pulso de sondeo. Se consideraron energías de probe suficientemente grandes de forma tal que $\zeta_x = \zeta_y$ y un potencial externo V nulo. La intensidad obtenida en función de $\theta_{\mathbf{k}}$ responde a la Ec. (3.39). Si se consideran un potencial V no nulo y las cuatro bandas en el hamiltoniano [ver Ec. (3.43)], es decir, no se ignoran las contribuciones a los elementos de matriz provenientes de las bandas más energéticas, los espectros de fotoemisión a energía constante son como los indicados en la Fig. 3.13. Notar que en este caso se genera una diferencia de intensidad entre los dos máximos del modelo efectivo que se observan en la Fig. 3.12.

En la Fig. 3.14 se indican las probabilidades de fotoemisión tanto en el valle \mathbf{K} (I) como el \mathbf{K}' (II) del modelo efectivo fuera del equilibrio con una frecuencia de excitación de $\hbar\Omega = 200$ meV en función de la amplitud del campo aplicado. Se utilizó una pola-

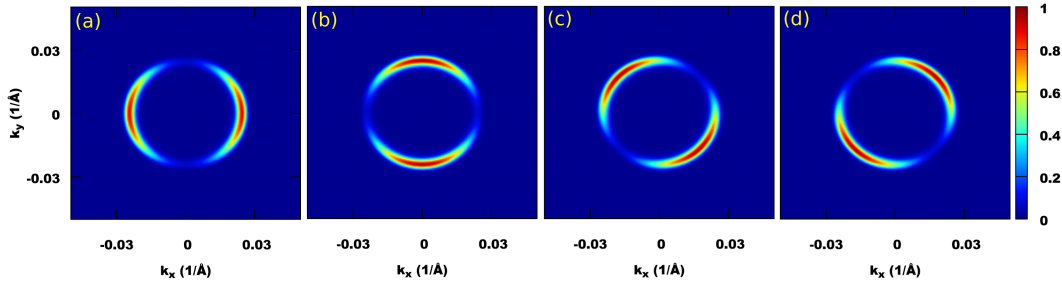


Figura 3.12: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión en una bicapa de grafeno en el modelo efectivo a energía constante $E = 100$ meV con distinta polarización del pulso de probe. (a) $\chi = 0$, (b) $\chi = \frac{\pi}{2}$, (c) $\chi = \frac{\pi}{4}$ y (d) $\chi = \frac{7\pi}{4}$. El sistema se encuentra sometido a una diferencia de potencial $V = 30$ meV.

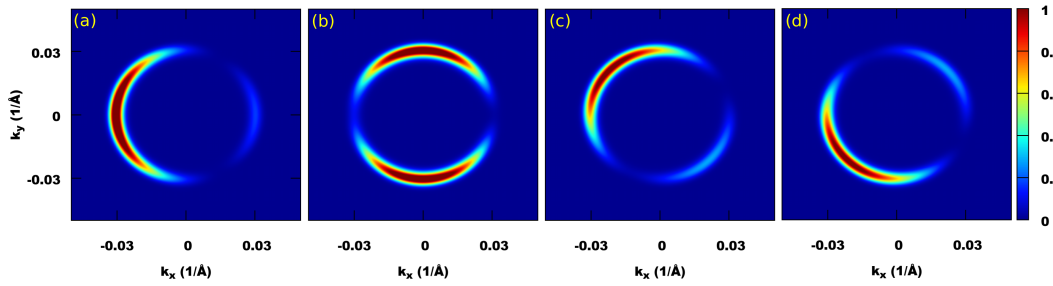


Figura 3.13: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión de una bicapa de grafeno en el modelo de cuatro bandas a energía constante $E = 100$ meV con distinta polarización del pulso de probe. (a) $\chi = 0$, (b) $\chi = \frac{\pi}{2}$, (c) $\chi = \frac{\pi}{4}$ y (d) $\chi = \frac{7\pi}{4}$.

rización circular del pulso de sondeo ($\chi = \frac{\pi}{4}$) y se consideraron energías de incidencia suficientemente bajas de forma tal que $\beta = \frac{\pi}{2}$. El potencial aplicado es tal que a campo nulo el gap entre bandas es de $2V = 60$ meV [Figs. 3.14 (I.a) y (II. a)]. En este caso, según la Ec. (3.37), los elementos de matriz permiten únicamente la fotoemisión de los sitios de la subred \mathcal{A} . A medida que aumenta la amplitud del campo de radiación la brecha prohibida alrededor de $k = 0$ se hace cada vez más pequeña en el cuasi-impulso \mathbf{K}' hasta que las bandas se tocan cuadráticamente, produciéndose la inversión de intensidades esperada. Se debe tener en cuenta que el cálculo realizado en perturbaciones de cuarto orden en el campo aplicado en la Sección 2.5 tenía en consideración únicamente la mezcla con las réplicas de $\pm 2\hbar\Omega$. Los parámetros utilizados en esta simulación implicarían según la Ec. (2.51) un campo crítico de $A_{0c} = 177$ meV. Se puede observar que el valor real es al menos 30 meV menor, indicando que para estas magnitudes de campo (correspondientes a un régimen de acoplamiento fuerte) es necesario considerar mezclas con réplicas de orden superior para una mejor descripción del sistema. Por otro lado, se observa que la magnitud del gap en \mathbf{K} aumenta para todo campo amplificado, sin producirse por ende la inversión de pseudo-espín en este cuasi-impulso.

Tomando en consideración el hamiltoniano completo con las cuatro bandas se calcularon los espectros de fotoemisión para $\hbar\Omega = 500$ meV. Este valor se eligió con el fin de estar en condiciones similares al caso del modelo efectivo: las réplicas de mayor energía se encuentran alrededor de la magnitud característica del elemento de matriz

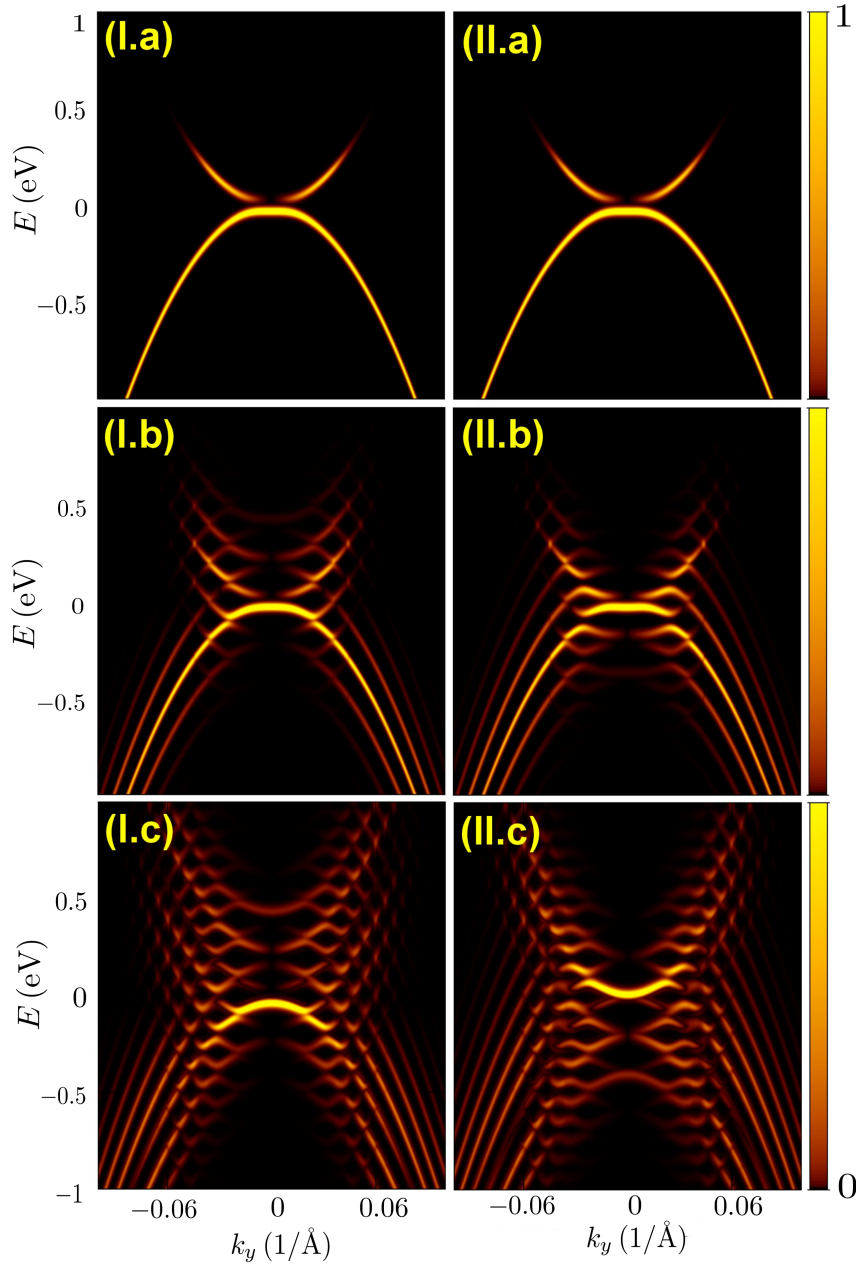


Figura 3.14: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión del modelo de dos bandas de la bicapa de grafeno irradiada en función de k_y con distintas intensidades de campo calculados para el cuasi-impulso \mathbf{K} (I) y para \mathbf{K}' (II): (a) $A_0 = 0$ eV (b) $A_0 = 60$ meV (c) $A_0 = 150$ meV.

$t_{\perp} \simeq 300$ meV y una frecuencia de excitación mayor generaría anticruces entre estados más energéticos, despreciados en el modelo efectivo, y los de baja energía. En la Fig. 3.15 se muestran los resultados para distintas amplitudes de pulso de excitación en los valles \mathbf{K} y \mathbf{K}' . Nótese que para amplitudes de pump suficientemente pequeñas el modelo efectivo de dos bandas describe de forma satisfactoria los espectros de cuatro bandas para estados de baja energía. Sin embargo al aumentar la amplitud de la radiación de excitación hasta los valores necesarios para producir la transición ($\sim A_0^4$) comienzan a tomar peso las réplicas de mayor energía, despreciadas en el modelo efectivo, generan-

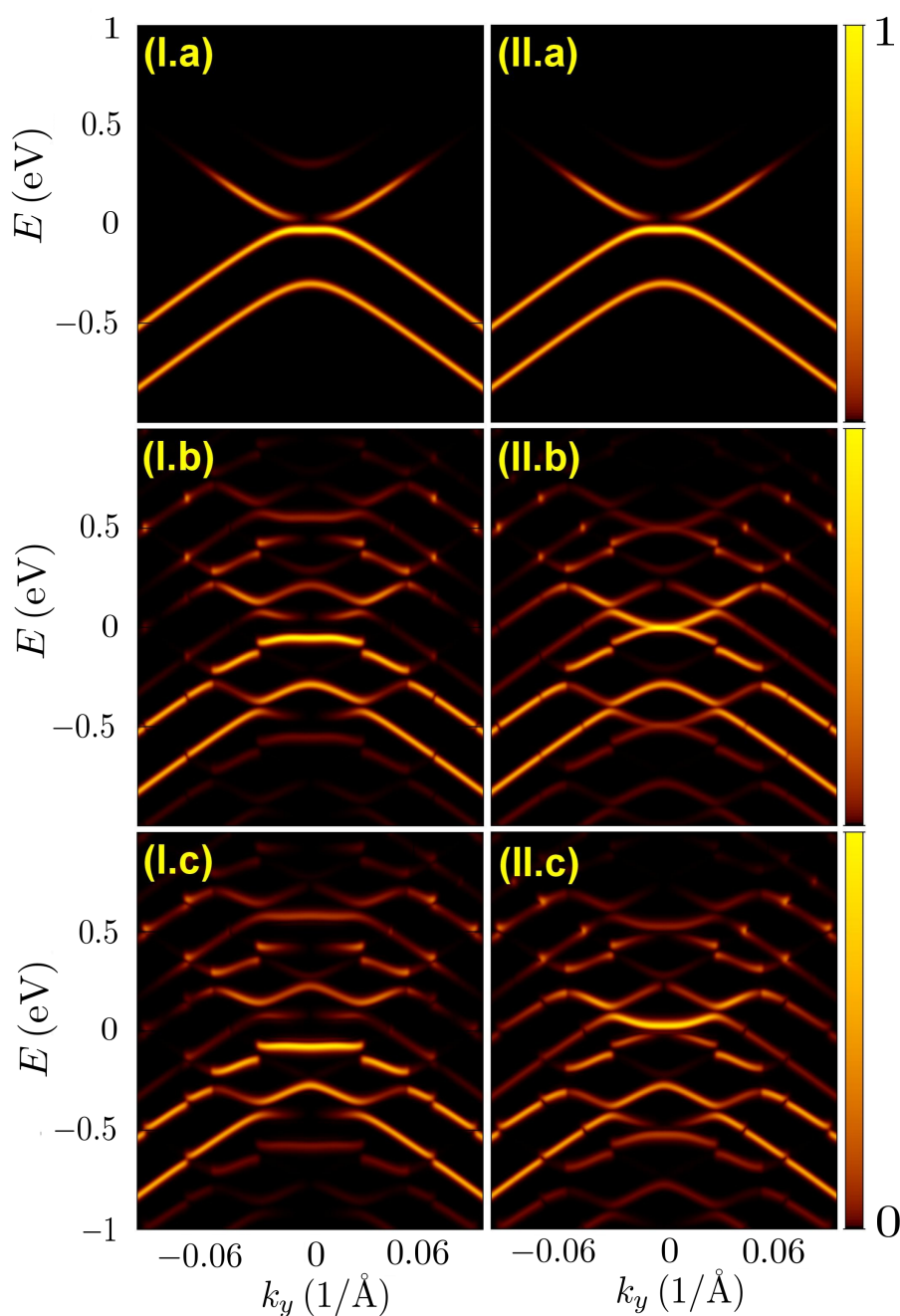


Figura 3.15: Mapas de color de la probabilidad de fotoemisión del modelo de cuatro bandas de la bicapa de grafeno irradiada en función de k_y con distintas intensidades de campo calculados para el cuasi-impulso \mathbf{K} (I) y para \mathbf{K}' (II): (a) $A_0 = 0$ eV, (b) $A_0 = 100$ meV y (c) $A_0 = 150$ meV.

do un comportamiento complejo en el espectro de cuasi-energías. Aún así es posible visualizar con estos parámetros la inversión de bandas.

Capítulo 4

Conductividad Hall de un sistema irradiado con pulsos ultra-cortos

“It looks strange, and it looks strange, and it looks very strange. And then suddenly, it doesn’t look strange at all, and you can’t understand what made it look strange in the first place.”

— Gertrude Stein.

4.1. Formulación del problema.

En este capítulo se desarrolla el estudio de la respuesta Hall dinámica en sistemas forzados a un estado de no-equilibrio al ser sometidos a una perturbación externa dependiente del tiempo. Una figura esquemática de un posible arreglo experimental se muestra en la Fig. 4.1, donde dos contactos transversales a una corriente de *bias* J_y miden la diferencia de potencial $V_H(t)$ como función del tiempo generada por la presencia de pulsos electromagnéticos de frecuencia Ω . En el desarrollo de aquí en más no se considerarán dependencias espaciales del pulso, analizando únicamente los efectos en la región irradiada. Se asume incidencia normal de la radiación y un *spot* del láser mayor que el tamaño del sistema.

Esta perturbación en general posee efectos no lineales y, por lo tanto, es necesaria incluirla en todos los órdenes para un cálculo adecuado de cualquier propiedad de transporte del sistema. Es posible realizar una derivación análoga a la usual para la fórmula de Kubo en estos casos. Consideremos un hamiltoniano dependiente del tiempo de la forma

$$\mathcal{H}(t) = H_0(t) + V(t), \quad (4.1)$$

donde $H_0(t)$ incluye en todos los órdenes los efectos de la perturbación externa y $V(t)$ es el término de potencial debido a la presencia del campo eléctrico del *bias* que induce

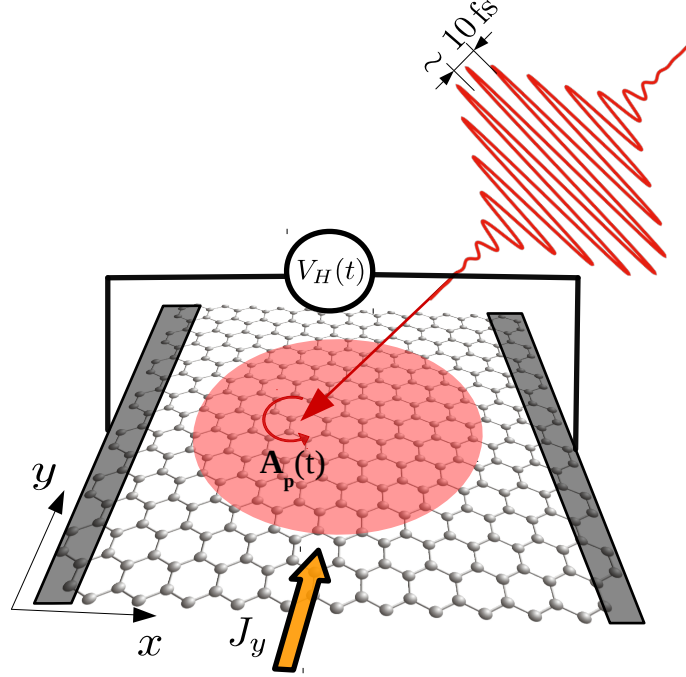


Figura 4.1: Esquema de una muestra de grafeno sometida a una corriente longitudinal externa J_y e iluminada con pulsos láser con períodos típicos de ~ 10 fs ($\hbar\Omega \sim 400$ meV) y polarización circular, indicada en la figura con el potencial vector del pump $A_p(t)$. Dos contactos transversales miden la tensión Hall $V_H(t)$ en función del tiempo.

la corriente J_y . Se define una representación de interacción generalizada como

$$\begin{aligned} |\Psi_I(t)\rangle &= \mathcal{U}_0(-\infty, t) |\Psi_S(t)\rangle = \mathcal{U}_0(-\infty, t) \mathcal{U}(t, -\infty) |\Psi_S(-\infty)\rangle \\ \mathcal{O}_I(t) &= \mathcal{U}_0(-\infty, t) \mathcal{O}_S(t) \mathcal{U}_0(t, -\infty), \end{aligned} \quad (4.2)$$

donde $|\Psi_I(t)\rangle$ y $\mathcal{O}_I(t)$ son las funciones de onda y operadores en la nueva representación y el operador unitario que transforma de la representación de Schrödinger original a la de interacción es $\mathcal{U}_0(t, -\infty)$, el operador evolución asociado al hamiltoniano $H_0(t)$. El operador $\mathcal{U}(t, -\infty)$ es el correspondiente a la evolución completa de la función de onda, incluyendo los efectos de $V(t)$. Notar que si H_0 es independiente del tiempo, el cambio de representación se reduce al caso usual $|\Psi_I(t)\rangle = e^{\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\Psi_S(t)\rangle$. Interesa encontrar una ecuación integral para la transformación que lleva los estados $|\Psi_S(-\infty)\rangle$ a los estados evolucionados, con el objetivo de posibilitar una expansión en serie en la perturbación del bias externo. Definiendo $\mathcal{S}(t, -\infty) = \mathcal{U}_0(-\infty, t) \mathcal{U}(t, -\infty)$, se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial \mathcal{S}(t, -\infty)}{\partial t} = \mathcal{U}_0(-\infty, t) V(t) \mathcal{U}(t, -\infty), \quad (4.3)$$

donde se utilizaron las ecuaciones de movimiento para los operadores evolución

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\mathcal{U}(t, -\infty) &= \mathcal{H}(t)\mathcal{U}(t, -\infty) \\ i\hbar\partial_t\mathcal{U}_0(t, -\infty) &= H_0(t)\mathcal{U}_0(t, -\infty). \end{aligned} \quad (4.4)$$

En vistas de que $\mathcal{U}(t, -\infty)$ contiene todos los órdenes en $V(t)$ y con la finalidad de mantener únicamente el término lineal en la perturbación se realiza el reemplazo $\mathcal{U}(t, -\infty) \rightarrow \mathcal{U}_0(t, -\infty)$ en la Ec. (4.3), obteniendo así en este orden de aproximación y luego de integrar

$$\mathcal{S}_1(t, -\infty) = \mathcal{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \mathcal{U}_0(-\infty, t') V(t') \mathcal{U}_0(t', -\infty) dt' = \mathcal{I} + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t V_I(t') dt'. \quad (4.5)$$

Por lo tanto, los valores medios termodinámicos de los operadores en respuesta lineal están dados por

$$\langle \mathcal{O}_S(t) \rangle = \text{Tr}[\rho_S(t) \mathcal{O}_S(t)], \quad (4.6)$$

con la matriz densidad $\rho_S(t) = \sum_{\alpha} f(\varepsilon_{\alpha}) |\Psi_S^{\alpha}(t)\rangle \langle \Psi_S^{\alpha}(t)|$, siendo α el conjunto de números cuánticos que definen los estados sin perturbar del hamiltoniano a tiempos $-\infty$ y $f(\varepsilon)$ la función de ocupación de Fermi-Dirac. Por lo tanto,

$$\langle \mathcal{O}_S(t) \rangle = \sum_{\alpha} f(\varepsilon_{\alpha}) \langle \Psi_S^{\alpha} | \mathcal{S}_1^{\dagger}(t, -\infty) \mathcal{U}_0(-\infty, t) \mathcal{O}_S(t) \mathcal{U}_0(t, -\infty) \mathcal{S}_1(t, -\infty) | \Psi_S^{\alpha} \rangle, \quad (4.7)$$

utilizando de aquí en más la notación $|\Psi_S^{\alpha}(-\infty)\rangle = |\Psi_S^{\alpha}\rangle$ para los estados de H_0 previos a cualquier perturbación. Reemplazando la Ec. (4.5) en (4.7) se obtiene finalmente

$$\langle \mathcal{O}_S(t) \rangle = \sum_{\alpha} f(\varepsilon_{\alpha}) \left[\langle \Psi_S^{\alpha} | \mathcal{O}_I(t) | \Psi_S^{\alpha} \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \Psi_S^{\alpha} | [\mathcal{O}_I(t), V_I(t')] | \Psi_S^{\alpha} \rangle dt' \right], \quad (4.8)$$

donde $[\mathcal{O}_I(t), V_I(t')]$ es el conmutador de ambos operadores en la representación definida en la Ec. (4.2).

Interesa entonces estudiar la presencia de una corriente transversal a la dirección de la corriente inducida por el potencial externo. La elección de gauge para acoplar el campo eléctrico del bias al sistema se realiza de forma tal de mantener la invariancia traslacional (es decir, $V(\mathbf{r}, t) = V(t)$) y, por lo tanto, preservar al cuasi-impulso cristalino \mathbf{k} como un buen número cuántico.

Considerando un hamiltoniano cuadrático en los operadores fermiónicos (sin interacciones), en aproximación de tight-binding a primeros vecinos y bajo irradiación

$$\mathcal{H}(t) = -t \sum_{\mathbf{j}\delta} \left[c_{\mathbf{j}+\delta}^{\dagger} c_{\mathbf{j}} e^{\frac{i2\pi}{\phi_0} \int_{\mathbf{j}}^{\mathbf{j}+\delta} \mathbf{A}(t) \cdot d\mathbf{l}} + c_{\mathbf{j}}^{\dagger} c_{\mathbf{j}+\delta} e^{-\frac{i2\pi}{\phi_0} \int_{\mathbf{j}}^{\mathbf{j}+\delta} \mathbf{A}(t) \cdot d\mathbf{l}} \right], \quad (4.9)$$

donde $\phi_0 = \frac{ch}{e}$ es el cuanto de flujo y $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_p(t) + \mathbf{A}_b(t)$, siendo $\mathbf{A}_p(t)$ el potencial vector correspondiente al pump y $\mathbf{A}_b(t)$ el correspondiente al bias. El acoplamiento con los campos externos se realizó agregando fases complejas al elemento de matriz de salto (*hopping*) t , equivalente a la sustitución de Peierls. Manteniendo el orden lineal en la perturbación del bias y desarrollando la exponencial de la Ec. (4.9):

$$\mathcal{H}(t) \simeq -t \sum_{\mathbf{j}\delta} \left[c_{\mathbf{j}+\delta}^\dagger c_{\mathbf{j}} e^{\frac{i2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_p(t) \cdot \delta} \left(1 + \frac{i2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_b(t) \cdot \delta \right) + c_{\mathbf{j}}^\dagger c_{\mathbf{j}+\delta} e^{-\frac{i2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_p(t) \cdot \delta} \left(1 - \frac{i2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_b(t) \cdot \delta \right) \right] \quad (4.10)$$

Definiendo los operadores fermiónicos en el espacio recíproco como:

$$c_{\mathbf{j}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}} \quad c_{\mathbf{j}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}}^\dagger e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{j}} \quad (4.11)$$

y reemplazando en la Ec. (4.10) se obtiene

$$\mathcal{H}(t) = -t \sum_{\mathbf{k}\delta} \left[c_{\mathbf{k}+\delta}^\dagger c_{\mathbf{k}} e^{i[\mathbf{k} + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_p(t)] \cdot \delta} \left(1 + \frac{2\pi i}{\phi_0} \mathbf{A}_b(t) \cdot \delta \right) + c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\delta} e^{-i[\mathbf{k} + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_p(t)] \cdot \delta} \left(1 - \frac{2\pi i}{\phi_0} \mathbf{A}_b(t) \cdot \delta \right) \right]. \quad (4.12)$$

Considerando que $H_0(\mathbf{k}, t)$ es aquel independiente de $\mathbf{A}_b(t)$ y que posee el acoplamiento en todos los órdenes con el campo de radiación del pump

$$H_0(\mathbf{k}, t) = -t \sum_{\delta} \left[c_{\mathbf{k}+\delta}^\dagger c_{\mathbf{k}} e^{-i[\mathbf{k} + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_p(t)] \cdot \delta} + c_{\mathbf{k}}^\dagger c_{\mathbf{k}+\delta} e^{i[\mathbf{k} + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_p(t)] \cdot \delta} \right], \quad (4.13)$$

el Hamiltoniano total adquiere la forma

$$\mathcal{H}(t) = \sum_{\mathbf{k}} \left[H_0(\mathbf{k}, t) + \frac{2\pi}{\phi_0} \mathbf{A}_b(t) \cdot \frac{\partial H_0(\mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{k}} \right] = \sum_{\mathbf{k}} \left[H_0(\mathbf{k}, t) - \frac{1}{c} \mathbf{A}_b(t) \cdot \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \right], \quad (4.14)$$

donde $\mathbf{j}_{\mathbf{k}}(t) = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial H_0(\mathbf{k}, t)}{\partial \mathbf{k}}$. Según la fórmula de Kubo (Ec. 4.8) para la corriente total en el sistema irradiado

$$\langle \mathbf{J}(t) \rangle = \sum_{\mathbf{k}\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \left[\langle \mathbf{k}\alpha | \mathbf{j}_{\mathbf{k}}^I(t) | \mathbf{k}\alpha \rangle + \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \mathbf{k}\alpha | [\mathbf{j}_{\mathbf{k}}^I(t), V_{\mathbf{k}}^I(t')] | \mathbf{k}\alpha \rangle dt' \right], \quad (4.15)$$

$$\mathbf{j}_{\mathbf{k}}^I(t) = \mathcal{U}_{0\mathbf{k}}(-\infty, t) \mathbf{j}_{\mathbf{k}} \mathcal{U}_{0\mathbf{k}}(t, -\infty),$$

$$V_{\mathbf{k}}^I(t') = \frac{e}{c\hbar} \mathcal{U}_{0\mathbf{k}}(-\infty, t') \nabla_{\mathbf{k}} H_0(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{A}_b(t') \mathcal{U}_{0\mathbf{k}}(t', -\infty) = -\frac{1}{c} \mathbf{j}_{\mathbf{k}}^I(t') \cdot \mathbf{A}_b(t').$$

Teniendo en cuenta que el campo eléctrico está dado por $\mathbf{E}_b(t) = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}_b(t)}{\partial t}$, se considera la siguiente dependencia temporal del potencial vector del bias

$$\mathbf{A}_b(t) = -cE_0 \frac{1}{\eta} \log(e^{\eta t} + 1) \hat{\mathbf{y}} = -cE_0 \mathcal{W}(t) \hat{\mathbf{y}}, \quad (4.16)$$

de forma tal de garantizar que para $t \rightarrow -\infty$ la perturbación sea nula y que para tiempos $t \gg \frac{1}{\eta}$ su comportamiento sea lineal, generando así un campo eléctrico constante en el tiempo y en el espacio. La forma resultante para la conductividad Hall, definida como $\sigma_{xy}(t) = \frac{\partial \langle J_x(t) \rangle}{\partial E_0}$ está dada entonces por funciones de correlación de dos tiempos:

$$\sigma_{xy}(t) = \sum_{\mathbf{k}\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \left[\frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \mathbf{k}\alpha | [j_{\mathbf{k}x}^I(t), j_{\mathbf{k}y}^I(t')] | \mathbf{k}\alpha \rangle \mathcal{W}(t') dt' \right]. \quad (4.17)$$

Si bien los propagadores involucrados en la representación de interacción en la que se encuentran los operadores corriente deben ser calculados numéricamente, es de utilidad estudiar algunos casos límites donde la respuesta Hall determinada por la fórmula de Kubo expuesta [Ec. (4.17)] se puede estudiar en forma analítica. A continuación se analizarán los casos sencillos donde $H_0(\mathbf{k}, t) = H_0(\mathbf{k})$ (es decir un sistema no perturbado), el límite de un cambio súbito (*quench*) de parámetros presentes en el hamiltoniano, un encendido súbito de un campo de radiación monocromático y el límite adiabático total. Los mismos ayudarán a comprender en cierta medida los resultados numéricos para el sistema sometido a perturbaciones pulsadas.

4.2. Hamiltoniano sin perturbación - Cuantización de la conductividad Hall

En el caso de un hamiltoniano estático (sin perturbación) la Ec. (4.17) puede llevarse a una forma más compacta. Los estados evolucionados adquieren simplemente una fase dinámica y la conductividad Hall se puede expresar como

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(t) = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \int_{-\infty}^t & \left[e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t-t')} \langle \mathbf{k}\alpha | j_x | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | j_y | \mathbf{k}\alpha \rangle - \right. \\ & \left. e^{-i\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t-t')} \langle \mathbf{k}\alpha | j_y | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | j_x | \mathbf{k}\alpha \rangle \right] \mathcal{W}(t') dt', \end{aligned} \quad (4.18)$$

donde $\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} - \varepsilon_{\mathbf{k}\beta}}{\hbar}$ y se utilizó la descomposición espectral del propagador

$$\mathcal{U}_{0\mathbf{k}}(t, t') = \sum_{\beta} |\mathbf{k}\beta(t)\rangle \langle \mathbf{k}\beta(t')| = \sum_{\beta} e^{-\frac{i\varepsilon_{\mathbf{k}\beta}(t-t')}{\hbar}} |\mathbf{k}\beta\rangle \langle \mathbf{k}\beta|. \quad (4.19)$$

Realizando la integral temporal considerando una dependencia funcional del bias $\mathcal{W}(t') = \lim_{\eta \rightarrow 0} t' e^{|\eta|t'}$ se obtiene

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(t) = & \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \frac{\langle \mathbf{k}\alpha | j_x | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | j_y | \mathbf{k}\alpha \rangle - \langle \mathbf{k}\alpha | j_y | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | j_x | \mathbf{k}\alpha \rangle}{\left[\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} \right]^2} \\ & + \frac{t}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha\beta} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \frac{\langle \mathbf{k}\alpha | j_x | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | j_y | \mathbf{k}\alpha \rangle + \langle \mathbf{k}\alpha | j_y | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | j_x | \mathbf{k}\alpha \rangle}{\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}}. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Notar que si bien se modificó la forma funcional $\mathcal{W}(t)$ del encendido del bias para obtener una integral más sencilla en el tiempo, el resultado es independiente del mismo siempre y cuando se obtenga a tiempos suficientemente grandes un campo eléctrico constante en el tiempo. Teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}\alpha | j_\nu | \mathbf{k}\beta \rangle &= -\frac{e}{\hbar} \langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial H_0(\mathbf{k})}{\partial k_\nu} | \mathbf{k}\beta \rangle \\ &= -\frac{e}{\hbar} \left[\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\beta}}{\partial k_\nu} \delta_{\alpha\beta} + (\varepsilon_{\mathbf{k}\beta} - \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial}{\partial k_\nu} | \mathbf{k}\beta \rangle \right] \end{aligned} \quad (4.21)$$

y que los términos diagonales $\alpha = \beta$ se anulan podemos reemplazar en la Ec. (4.20):

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}(t) = & -\frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha \neq \beta} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \left[\langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial}{\partial k_x} | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | \frac{\partial}{\partial k_y} | \mathbf{k}\alpha \rangle - \langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial}{\partial k_y} | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | \frac{\partial}{\partial k_x} | \mathbf{k}\alpha \rangle \right] \\ & - \frac{e^2 t}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha \neq \beta} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} \left[\langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial}{\partial k_x} | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | \frac{\partial}{\partial k_y} | \mathbf{k}\alpha \rangle + \langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial}{\partial k_y} | \mathbf{k}\beta \rangle \langle \mathbf{k}\beta | \frac{\partial}{\partial k_x} | \mathbf{k}\alpha \rangle \right]. \end{aligned} \quad (4.22)$$

El segundo término del lado derecho de la Ec. (4.22), proporcional al tiempo, es idénticamente nulo. El mismo se puede reescribir como

$$-\frac{e^2 t}{\hbar^2} \sum_{\mathbf{k}\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \left[\langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial^2 H_0(\mathbf{k})}{\partial k_x \partial k_y} | \mathbf{k}\alpha \rangle - \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}}{\partial k_x \partial k_y} \right] = 0. \quad (4.23)$$

Por otro lado, el término restante es de la forma

$$\sigma_{xy}(t) = -\frac{ie^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \left[\left\langle \frac{\partial \mathbf{k}\alpha}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial \mathbf{k}\alpha}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \mathbf{k}\alpha}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial \mathbf{k}\alpha}{\partial k_x} \right\rangle \right], \quad (4.24)$$

donde se tomó en cuenta que por ortogonalidad entre los estados

$$\langle \mathbf{k}\alpha | \frac{\partial}{\partial k_\nu} | \mathbf{k}\beta \rangle = \left\langle \mathbf{k}\alpha \middle| \frac{\partial \mathbf{k}\beta}{\partial k_\nu} \right\rangle = - \left\langle \frac{\partial \mathbf{k}\alpha}{\partial k_\nu} \middle| \mathbf{k}\beta \right\rangle. \quad (4.25)$$

Recordemos que la curvatura de Berry para una banda α está definida como:

$$\mathcal{F}_\alpha(\mathbf{k}) \equiv -i \langle \nabla_{\mathbf{k}} u_\alpha(\mathbf{k}) | \times | \nabla_{\mathbf{k}} u_\alpha(\mathbf{k}) \rangle \quad (4.26)$$

y por lo tanto

$$\sigma_{xy}(t) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \mathcal{F}_\alpha^z(\mathbf{k}) \stackrel{(T \equiv 0)}{=} \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \in \text{occ}} \int_{BZ} \mathcal{F}_\alpha^z(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k}. \quad (4.27)$$

La integral se realiza sobre toda la zona de Brillouin y a temperatura cero la suma sobre α se encuentra restringida a bandas ocupadas. Se reobtiene entonces el resultado ya derivado por Thouless *et al* [3], la conductividad Hall se encuentra cuantizada en unidades de $\frac{e^2}{h}$ y la constante de proporcionalidad es el invariante topológico conocido como el número de Chern

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \in \text{occ}} \int_{BZ} \mathcal{F}_\alpha^z(\mathbf{k}) d^2\mathbf{k} = \sum_{\alpha \in \text{occ}} \mathcal{C}_\alpha. \quad (4.28)$$

Es fácil ver de la expresión (4.27) que si el sistema posee simetría de inversión temporal, la conductividad Hall es nula. Si aplicamos el operador de inversión \mathcal{T} sobre la componente \hat{z} de la curvatura encontramos que

$$\begin{aligned} \mathcal{T}[\mathcal{F}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{z}] &= -i\epsilon_{ij} \int d^3r \partial_{k_i} [\mathcal{T} u_{\alpha,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r})] \partial_{k_j} [\mathcal{T} u_{\alpha,\mathbf{k}}(\mathbf{r})] \\ &= -i\epsilon_{ij} \int d^3r \partial_{k_i} u_{\alpha,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \partial_{k_j} u_{\alpha,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \\ &= -i\epsilon_{ji} \int d^3r \partial_{k_i} u_{\alpha,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \partial_{k_j} u_{\alpha,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= i\epsilon_{ij} \int d^3r \partial_{k_i} u_{\alpha,-\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \partial_{k_j} u_{\alpha,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= -\mathcal{F}_\alpha(-\mathbf{k}) \cdot \hat{z}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde se uso que para las funciones de onda de Bloch $\mathcal{T} \langle \mathbf{r} | u_\alpha(\mathbf{k}) \rangle = \langle u_\alpha(-\mathbf{k}) | \mathbf{r} \rangle$. Si el sistema posee simetría de inversión temporal $\mathcal{T}[\mathcal{F}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{z}] = \mathcal{F}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{z}$ y por lo tanto $\mathcal{F}_\alpha(\mathbf{k}) \cdot \hat{z} = -\mathcal{F}_\alpha(-\mathbf{k}) \cdot \hat{z}$. Se entiende entonces que al integrar esta magnitud en toda la zona de Brillouin existirá una cancelación al tomar en cuenta las contribuciones provenientes de \mathbf{k} y $-\mathbf{k}$.

El hecho de que un sistema pueda presentar conductividad Hall en ausencia de campo magnético se encuentra relacionado a la adquisición de una velocidad anómala de los estados de Bloch en un sistema con curvatura de Berry no nula. En efecto, la velocidad de los estados se puede escribir en términos de la misma como [42]

$$\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}}{\partial \mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \times \mathcal{F}_\alpha(\mathbf{k}), \quad (4.30)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}$ es la relación de dispersión de la banda α y \mathbf{E} es un campo eléctrico externo. En este sentido, se entiende que en presencia de un campo eléctrico $\mathbf{E} = E_y \hat{\mathbf{y}}$

$$\begin{aligned} j_x &= -ev_x = \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) [\mathbf{E} \times \mathcal{F}_{\alpha}(\mathbf{k})]_x d^2k \\ &= \frac{e^2}{\hbar} \frac{E_y}{(2\pi)^2} \sum_{\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \mathcal{F}_{\alpha}^z(\mathbf{k}) d^2k \end{aligned} \quad (4.31)$$

4.3. Respuesta ante un cambio súbito en el Hamiltoniano.

Es de interés entender cuál es la respuesta dinámica que se espera ante la presencia de una perturbación súbita a tiempo t_0 que lleva un hamiltoniano inicial $H_i(\mathbf{k})$ a uno final $H_f(\mathbf{k})$ con diferente topología. Las funciones de onda y el operador evolución de dos tiempos se pueden expresar para $t > t_0$ como

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{k}\alpha}(t)\rangle &= \sum_f \langle \phi_{\mathbf{k}f} | \mathbf{k}\alpha \rangle e^{-i\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}f}(t-t_0)}{\hbar}} |\phi_{\mathbf{k}f}\rangle = \sum_f \Lambda_{f\alpha}^{\mathbf{k}} e^{-i\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}f}(t-t_0)}{\hbar}} |\phi_{\mathbf{k}f}\rangle \quad (4.32) \\ \mathcal{U}_{0\mathbf{k}}(t, t') &= \sum_{\beta} |\Psi_{\mathbf{k}\beta}(t)\rangle \langle \Psi_{\mathbf{k}\beta}(t')| = \sum_{\gamma} e^{-i\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma}(t-t')}{\hbar}} |\phi_{\mathbf{k}\gamma}\rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}|, \end{aligned}$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}f}$ son las energías de los autoestados $|\phi_{\mathbf{k}f}\rangle$ de $H_f(\mathbf{k})$. Se utilizará la notación $\Lambda_{f\alpha}^{\mathbf{k}} = \langle \phi_{\mathbf{k}f} | \mathbf{k}\alpha \rangle$ para indicar la proyección del autoestado f en el estado del hamiltoniano original α . La función de correlación a calcular adquiere en esta base la expresión

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \langle \mathbf{k}\alpha | [j_{\mathbf{k}x}^I(t), j_{\mathbf{k}y}^I(t')] | \mathbf{k}\alpha \rangle t' dt' &= \sum_{\gamma} \sum_{f'} \Lambda_{f'\alpha}^{\mathbf{k}*} \Lambda_{f\alpha}^{\mathbf{k}} \\ &\int_{t_0}^t e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f'}(t-t_0)} e^{-i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f}(t'-t_0)} \langle \phi_{\mathbf{k}f'} | j_{\mathbf{k}x} | \phi_{\mathbf{k}\gamma} \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma} | j_{\mathbf{k}y} | \phi_{\mathbf{k}f} \rangle t' dt' - h.c. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Considerando los términos diagonales ($f = f'$) de esta expresión —que son aquellos que contribuyen a la media de la respuesta, ya que el resto son oscilatorios— se realiza la integral temporal

$$\int_{t_0}^t e^{-i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f}(t'-t)} t' dt' = \frac{1}{\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f 2}} [1 - e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f}(t-t_0)}] + \frac{i}{\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f}} [t - e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f}(t-t_0)} t_0]. \quad (4.34)$$

Reemplazando este resultado en la Ec. (4.33) y utilizando la Ec. (4.22) se obtienen las siguientes contribuciones a la función de correlación

$$-e^2 \sum_{\gamma f} |\Lambda_{f\alpha}^{\mathbf{k}}|^2 \left[1 - e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f}(t-t_0)} - i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f} [t - e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma f}(t-t_0)} t_0] \right] \langle \phi_{\mathbf{k}f} | \frac{\partial}{\partial k_x} | \phi_{\mathbf{k}\gamma} \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma} | \frac{\partial}{\partial k_y} | \phi_{\mathbf{k}f} \rangle - h.c. \quad (4.35)$$

El término proporcional al tiempo se anula en forma análoga a lo obtenido en la Ec. (4.23). En el límite de $t - t_0 \rightarrow \infty$ los términos oscilatorios no contribuyen a la media y se obtiene como resultado para la conductividad Hall

$$\sigma_{xy}(\infty) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha f} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) |\Lambda_{f\alpha}^{\mathbf{k}}|^2 \mathcal{F}_f^z(\mathbf{k}). \quad (4.36)$$

De este modo, vemos que la respuesta transversal en el límite de tiempos largos luego de un cambio súbito de los parámetros de $H_i(\mathbf{k})$ se puede expresar como la integral de la curvatura de Berry pesada por el número de ocupación en toda la zona de Brillouin. Este resultado fue discutido recientemente por Wang *et al* [43], siendo un primer indicio de que en sistemas fuera de equilibrio la conductividad Hall no está cuantizada, dependiendo fuertemente de las poblaciones en los estados finales y por ende de la dependencia temporal de la perturbación.

Es importante destacar que si se tomara como parámetro de orden topológico del nuevo estado el número de Chern de la función de onda evolucionada unitariamente, es decir

$$\mathcal{C}(t) = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \in \text{occ}} \int_{BZ} \mathcal{F}_{\alpha}^z(\mathbf{k}, t) d^2\mathbf{k} \quad (4.37)$$

$$\mathcal{F}_{\alpha}^z(\mathbf{k}, t) = -i \left[\left\langle \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\alpha}(t)}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\alpha}(t)}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\alpha}(t)}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\alpha}(t)}{\partial k_x} \right\rangle \right],$$

la topología sería siempre robusta ante una perturbación en el hamiltoniano, ya que $\partial_t \mathcal{C}(t) = 0$ [21]. Sin embargo, ésta no es la magnitud de relevancia involucrada en el cálculo de la conductancia Hall.

4.4. Encendido súbito de un campo electromagnético de frecuencia Ω

Es posible derivar un resultado análogo para el caso de los aislantes topológicos de Floquet (FTIs) sujetos a radiación con amplitud constante en el tiempo y considerando un encendido súbito del campo electromagnético a tiempo t_0 . Este tipo de perturbación genera naturalmente una ocupación de no equilibrio en las bandas de Floquet. En este

caso, las funciones de onda y el operador evolución de dos tiempos se pueden expresar para $t > t_0$ como

$$\begin{aligned} |\Psi_{\mathbf{k}\alpha}(t)\rangle &= \sum_{\delta} \langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t_0) | \mathbf{k}\alpha \rangle e^{-i\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\delta}(t-t_0)}{\hbar}} |\phi_{\mathbf{k}\delta}(t)\rangle = \sum_{\delta} \Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0) e^{-i\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\delta}(t-t_0)}{\hbar}} |\phi_{\mathbf{k}\delta}(t)\rangle \\ \mathcal{U}_{0\mathbf{k}}(t, t') &= \sum_{\beta} |\Psi_{\mathbf{k}\beta}(t)\rangle \langle \Psi_{\mathbf{k}\beta}(t')| = \sum_{\gamma} e^{-i\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma}(t-t')}{\hbar}} |\phi_{\mathbf{k}\gamma}(t)\rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t')|, \end{aligned} \quad (4.38)$$

donde $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ son las cuasi-energías de Floquet restringidas a la FFZ ($-\frac{\hbar\Omega}{2} < \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha} < \frac{\hbar\Omega}{2}$) y $|\phi_{\mathbf{k}}(t)\rangle$ son los autoestados del operador de Floquet de periodicidad Ω [ver Ec. (2.3)]. Se utilizará la notación $\Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0) = \langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t_0) | \mathbf{k}\alpha \rangle$ para indicar la proyección del autoestado de Floquet δ a tiempo t_0 en el estado del hamiltoniano sin perturbar α . La función de correlación a calcular adquiere en esta base la expresión

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \langle \mathbf{k}\alpha | [j_{\mathbf{k}x}^I(t), j_{\mathbf{k}y}^I(t')] | \mathbf{k}\alpha \rangle t' dt' &= \sum_{\gamma} \sum_{\delta\delta'} \Lambda_{\delta'\alpha}^{\mathbf{k}*}(t_0) \Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0) \\ \int_{t_0}^t e^{-i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma\delta'}(t-t_0)} e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\gamma\delta}(t'-t_0)} \langle \phi_{\mathbf{k}\delta'}(t) | j_{\mathbf{k}x} | \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t') | j_{\mathbf{k}y} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t') \rangle t' dt' &- h.c. \end{aligned} \quad (4.39)$$

Consideremos en primera instancia los términos diagonales ($\delta = \delta'$) en la Ec. (4.39). Mantener únicamente estos términos es equivalente a omitir las componentes no diagonales de la matriz densidad inicial, ya que

$$\rho_{\mathbf{k}}(t) = \sum_{\alpha} \sum_{\delta\delta'} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \Lambda_{\delta'\alpha}^{\mathbf{k}*}(t_0) \Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0) e^{-i\Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\delta'}(t-t_0)} |\phi_{\mathbf{k}\delta}(t)\rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\delta'}(t)|. \quad (4.40)$$

Teniendo en cuenta que los estados $|\phi_{\mathbf{k}\gamma}(t)\rangle$ verifican

$$[H_0(\mathbf{k}, t) - i\hbar\partial_t] |\phi_{\mathbf{k}\gamma}(t)\rangle = \varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} |\phi_{\mathbf{k}\gamma}(t)\rangle \quad (4.41)$$

se deriva la siguiente relación:

$$\langle \phi_{\mathbf{k}\delta} | \nabla_{\mathbf{k}} H_0(\mathbf{k}) | \phi_{\mathbf{k}\gamma} \rangle = i\hbar\partial_t [\langle \phi_{\mathbf{k}\delta} | \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}\gamma} \rangle] + \delta_{\gamma\delta} \nabla_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} + (\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\delta}) \langle \phi_{\mathbf{k}\delta} | \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}\gamma} \rangle, \quad (4.42)$$

que permite reescribir las componentes diagonales de la Ec. (4.39) como

$$\begin{aligned} \frac{e^2}{\hbar^2} \sum_{\delta\gamma} |\Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0)|^2 e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}(t-t')} &\left[i\hbar\partial_t [\langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \partial_{k_x} \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle] + (\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\delta}) \langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \partial_{k_x} \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle \right] \\ \int_{t_0}^t &\left[i\hbar\partial_{t'} [\langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t') | \partial_{k_y} \phi_{\mathbf{k}\delta}(t') \rangle] + (\varepsilon_{\mathbf{k}\delta} - \varepsilon_{\mathbf{k}\gamma}) \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t') | \partial_{k_y} \phi_{\mathbf{k}\delta}(t') \rangle \right] t' dt' - h.c., \end{aligned} \quad (4.43)$$

donde se omitieron los términos de $\delta = \gamma$ por anularse al restar el hermítico conjugado.

Es de utilidad en este punto utilizar la dependencia periódica en Ω de los autoestados de Floquet para reescribir

$$\langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \partial_{k_i} \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle = \sum_m e^{im\Omega t} C_{\delta\gamma i}^m, \quad (4.44)$$

donde

$$C_{\delta\gamma i}^m = \frac{1}{T} \int_0^T \langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \partial_{k_i} \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle e^{-im\Omega t} dt. \quad (4.45)$$

Introduciendo esta descomposición en la Ec. (4.43):

$$\begin{aligned} & -\frac{e^2}{\hbar^2} \sum_{\delta\gamma} \sum_{m,m'} |\Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0)|^2 \int_{t_0}^t e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}(t-t')} e^{im\Omega t + im'\Omega t'} C_{\delta\gamma x}^m C_{\gamma\delta y}^{m'} \\ & \left[\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\delta} - \hbar\Omega m \right] \left[\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\delta} + \hbar\Omega m' \right] t' dt' - h.c. \end{aligned} \quad (4.46)$$

La integral temporal puede realizarse explícitamente, obteniendo

$$\begin{aligned} & \int_{t_0}^t e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}(t-t')} e^{im\Omega t + im'\Omega t'} t' dt' = \\ & \frac{e^{i(m+m')\Omega t} [1 - it(m'\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma})] + e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}(t-t_0)} e^{i\Omega(m't_0 + mt)} [it_0(m'\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}) - 1]}{[m'\Omega - \Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}]^2}. \end{aligned} \quad (4.47)$$

El valor medio de esta magnitud es aquel obtenido al mantener únicamente los términos provenientes de dependencias de la forma $t - t'$, equivalente en las expresiones a igualar $m = -m'$. Tomando $t_0 = 0$ y simplificando luego de promediar se encuentra que la Ec. (4.46) se reduce a

$$-e^2 \sum_{\delta\gamma} \sum_m |\Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0)|^2 [1 + it(m\Omega + \Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}) - e^{i(\Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma} + m\Omega)t}] C_{\delta\gamma x}^m C_{\gamma\delta y}^{-m} - h.c. \quad (4.48)$$

Analicemos luego los distintos términos por separado. En primer lugar,

$$\begin{aligned} & \sum_{\gamma m} C_{\delta\gamma x}^m C_{\gamma\delta y}^{-m} - C_{\delta\gamma y}^m C_{\gamma\delta x}^{-m} = \\ & \frac{1}{T^2} \sum_{\gamma m} \int_0^T dt_1 \int_0^T dt_2 e^{-im\Omega(t_1-t_2)} \left(\langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t_1) | \partial_{k_x} | \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t_1) \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t_2) | \partial_{k_y} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t_2) \rangle \right. \\ & \quad \left. - \langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t_1) | \partial_{k_y} | \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t_1) \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t_2) | \partial_{k_x} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t_2) \rangle \right) = \\ & \frac{1}{T} \sum_{\gamma} \int_0^T dt \left(\langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \partial_{k_x} | \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) | \partial_{k_y} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) \rangle - \langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \partial_{k_y} | \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) | \partial_{k_x} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) \rangle \right) \\ & = -\frac{1}{T} \int_0^T dt \left[\left\langle \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\delta}(t)}{\partial k_x} \middle| \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\delta}(t)}{\partial k_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\delta}(t)}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial \phi_{\mathbf{k}\delta}(t)}{\partial k_x} \right\rangle \right] \end{aligned} \quad (4.49)$$

Por otra parte, es sencillo ver que el término proporcional al tiempo es idénticamente nulo

$$\begin{aligned}
& it \sum_{\gamma m} (m\Omega + \Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma}) \left[C_{\delta\gamma x}^m C_{\gamma\delta y}^{-m} + C_{\delta\gamma y}^m C_{\gamma\delta x}^{-m} \right] = \\
& \frac{it}{T} \sum_{\gamma} \int_0^T dt \Omega_{\mathbf{k}}^{\delta\gamma} \left(\langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \frac{\partial}{\partial k_x} | \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) | \frac{\partial}{\partial k_y} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) \rangle \right. \\
& \quad \left. + \langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \frac{\partial}{\partial k_y} | \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) \rangle \langle \phi_{\mathbf{k}\gamma}(t) | \frac{\partial}{\partial k_x} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) \rangle \right) = \\
& -\frac{it}{\hbar T} \int_0^T dt \left[\langle \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) | \frac{\partial^2 H_F(\mathbf{k}, t)}{\partial k_x \partial k_y} | \phi_{\mathbf{k}\delta}(t) \rangle - \frac{\partial^2 \varepsilon_{\mathbf{k}\delta}}{\partial k_x \partial k_y} \right] = 0,
\end{aligned} \tag{4.50}$$

utilizando que $H_F(\mathbf{k}, t) |\phi_{\mathbf{k}\delta}(t)\rangle = [H_0(\mathbf{k}) - i\hbar\partial_t] |\phi_{\mathbf{k}\delta}(t)\rangle = \varepsilon_{\mathbf{k}\delta} |\phi_{\mathbf{k}\delta}(t)\rangle$. Finalmente, la contribución a la media de la conductividad Hall que proviene de esta aproximación es de la forma

$$\bar{\sigma}_{xy}(\infty) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \sum_{\delta} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) |\Lambda_{\delta\alpha}^{\mathbf{k}}(t_0)|^2 \left(\frac{1}{T} \int_0^T \mathcal{F}_{\delta}^z(\mathbf{k}, t) dt \right), \tag{4.51}$$

debido a que en el límite de $t \rightarrow \infty$ la contribución proveniente del tercer término de la Ec. (4.48) es fuertemente oscilatoria y se anula al integrar en toda la zona de Brillouin. Un resultado análogo fue obtenido por Dehghani et al [12] pero donde se asume implícitamente que $t_0 \rightarrow -\infty$, es decir que la diferencia de potencial de bias en el tiempo de encendido es exponencialmente pequeña.

Nótese que de ser posible tener un estado inicial α que coincida con la réplica de Floquet δ a tiempo t_0 se obtendría el límite adiabático total para la respuesta. Este resultado fue obtenido en la referencia [28], donde se consideró una ocupación inicial estacionaria en el espectro de Floquet. La pregunta en ese caso es cómo preparar en forma dinámica un estado de Floquet a partir de los estados de equilibrio de las bandas originales del material.

4.5. Encendidos completamente adiabáticos.

Es posible obtener algunos resultados analíticos para el caso donde se considera una modificación de los parámetros que caracterizan al hamiltoniano original en el límite adiabático total, es decir con rampas de velocidad infinitesimalmente pequeña. Se comprende que si los pulsos son ultra-cortos y la perturbación induce o elimina degeneraciones en el espectro de energías que caracteriza al sistema esta aproximación no será válida. Sin embargo, los estados que se encuentran alejados de dichas situaciones serán bien descriptos por esta hipótesis. En este caso, los estados evolucionados se

pueden expresar como

$$|\Psi_{\mathbf{k}\alpha}(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t') dt'} |u_{\mathbf{k}\alpha}(t)\rangle, \quad (4.52)$$

donde $H(\mathbf{k}, t) |u_{\mathbf{k}\alpha}(t)\rangle = \varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}(t) |u_{\mathbf{k}\alpha}(t)\rangle$ y se considera que la fase de Berry está incluida en la definición de $|u_{\mathbf{k}\alpha}(t)\rangle$. Las funciones de correlación corriente-corriente adquieren la forma

$$\sum_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^t e^{i \int_{t'}^t \Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t'') dt''} \langle u_{\mathbf{k}\alpha}(t) | j_{\mathbf{k}x} | u_{\mathbf{k}\beta}(t) \rangle \langle u_{\mathbf{k}\beta}(t') | j_{\mathbf{k}y} | u_{\mathbf{k}\alpha}(t') \rangle t' dt' - h.c. \quad (4.53)$$

Consideraremos una perturbación que posee un tiempo de saturación, es decir, para todo $t > t_s$ se verifica $\frac{dH(\mathbf{k}, t > t_s)}{dt} = 0$. La conductividad Hall a tiempos mayores al de saturación se puede expresar como la suma de dos contribuciones

$$\sigma_{xy}(t) = \sigma_{xy}^{>t_s}(t) + \sigma_{xy}^{<t_s}, \quad (4.54)$$

donde $\sigma_{xy}^{>t_s}(t)$ involucra la integración de las correlaciones de dos tiempos en el intervalo $[t_s, t]$ y $\sigma_{xy}^{<t_s}$ en el intervalo $[-\infty, t_s]$. Es posible calcular la contribución a la conductividad Hall que proviene de la integración en tiempos mayores al de saturación, ya que se simplifica la dependencia temporal del *kernel* de la integral,

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{>t_s}(t) &= \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha\beta} \int_{t_s}^t e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s)(t-t')} \langle u_{\mathbf{k}\alpha}(t_s) | j_{\mathbf{k}x} | u_{\mathbf{k}\beta}(t_s) \rangle \langle u_{\mathbf{k}\beta}(t_s) | j_{\mathbf{k}y} | u_{\mathbf{k}\alpha}(t_s) \rangle t' dt' - h.c. \\ &= -\frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\alpha\beta} \left\{ \left[1 + it\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s) - e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s)(t-t_s)} (1 + it_s\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s)) \right] \times \right. \\ &\quad \left. \langle u_{\mathbf{k}\alpha}(t_s) | \frac{\partial}{\partial k_x} | u_{\mathbf{k}\beta}(t_s) \rangle \langle u_{\mathbf{k}\beta}(t_s) | \frac{\partial}{\partial k_y} | u_{\mathbf{k}\alpha}(t_s) \rangle - h.c. \right\}. \end{aligned} \quad (4.55)$$

El término proporcional al tiempo se anula por las mismas razones discutidas anteriormente, quedando restantes las siguientes dos contribuciones

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{>t_s}(t) &= \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \mathcal{F}_{\alpha}^z(\mathbf{k}, t_s) + \frac{e^2}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha\beta} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \left\{ \left[e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s)(t-t_s)} (1 + it_s\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s)) \right] \times \right. \\ &\quad \left. \langle u_{\mathbf{k}\alpha}(t_s) | \frac{\partial}{\partial k_x} | u_{\mathbf{k}\beta}(t_s) \rangle \langle u_{\mathbf{k}\beta}(t_s) | \frac{\partial}{\partial k_y} | u_{\mathbf{k}\alpha}(t_s) \rangle - h.c. \right\} \end{aligned} \quad (4.56)$$

En el límite de $t - t_s \rightarrow \infty$ tanto el segundo término como aquel proveniente de la correlación con tiempos anteriores al de saturación:

$$\sigma_{xy}^{<t_s} = \frac{1}{i\hbar} \sum_{\alpha\beta} \int_{-\infty}^{t_s} e^{i\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s)(t-t_s)} e^{-i\int_{t_s}^{t'} \Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t'')dt''} \langle u_{\mathbf{k}\alpha}(t_s) | j_{\mathbf{k}x} | u_{\mathbf{k}\beta}(t_s) \rangle \langle u_{\mathbf{k}\beta}(t') | j_{\mathbf{k}y} | u_{\mathbf{k}\alpha}(t') \rangle t' dt' - h.c., \quad (4.57)$$

tienden a cero. Se obtiene finalmente un valor medio finito para la conductividad Hall en el límite adiabático total:

$$\bar{\sigma}_{xy}^{\text{ad}}(\infty) = \frac{e^2}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha} f(\varepsilon_{\mathbf{k}\alpha}) \mathcal{F}_{\alpha}^z(\mathbf{k}, t_s) \stackrel{(T=0)}{=} \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha \in \text{occ}} \int_{BZ} \mathcal{F}_{\alpha}^z(\mathbf{k}, t_s) d^2\mathbf{k} = \frac{e^2}{\hbar} \mathcal{C}(t_s). \quad (4.58)$$

Nótese que el mismo es equivalente al invariante topológico $C(t_s)$ calculado a partir de los autoestados correspondientes al hamiltoniano de saturación final si la temperatura es nula y si el potencial químico μ es tal que no haya bandas parcialmente llenas. Para tiempos finitos se espera una respuesta dinámica, proveniente de las componentes oscilatorias con $\Omega_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta}(t_s)$ de la Ec. (4.56).

4.6. “Toy model”: Término de masa en el hamiltoniano de Dirac.

Un modelo sencillo que representa en buena medida los efectos dinámicos producidos por la radiación en los puntos de Dirac es el del encendido de un parámetro proporcional a σ_z (ver Cap. 2). En este modelo

$$H_{\mathbf{k}}^{\xi}(t) = \hbar v_f \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\xi k_x, k_y, \frac{\Delta(t)}{\hbar v_f} \right), \quad (4.59)$$

donde $\xi = \pm 1$ es el índice de valle, correspondiente a \mathbf{K} y \mathbf{K}' respectivamente. En el caso límite donde $\Delta(t) = \Delta_f \theta(t - t_0)$ las funciones de onda correspondientes al hamiltoniano final ($t > t_0$) se describen como

$$\begin{aligned} |\psi_{\mathbf{k}\xi}^+\rangle &= \left[\cos(\phi_{\mathbf{k}\xi}/2) a_{\mathbf{k}}^\dagger + \sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}/2) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} b_{\mathbf{k}}^\dagger \right] |0\rangle \\ |\psi_{\mathbf{k}\xi}^-\rangle &= \left[\sin(\phi_{\mathbf{k}\xi}/2) a_{\mathbf{k}}^\dagger - \cos(\phi_{\mathbf{k}\xi}/2) e^{i\xi\theta_{\mathbf{k}}} b_{\mathbf{k}}^\dagger \right] |0\rangle \end{aligned} \quad (4.60)$$

con $\tan(\phi_{\mathbf{k}\xi}) = \frac{\xi \hbar v_f k}{\Delta_f}$ y $\tan(\theta_{\mathbf{k}}) = \frac{k_y}{k_x}$ en la base de operadores de creación en las subredes \mathcal{A} y \mathcal{B} de la red hexagonal. Se encuentra analíticamente que para el caso donde $\varepsilon_F = 0$ y a $T = 0$, es decir, con una función de ocupación $f(\varepsilon) = \theta(\varepsilon)$, la respuesta Hall es de la forma

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{\xi}(t) &= \xi \frac{e^2 v_f^2}{2h} \int_0^{\Lambda} dk \left\{ \left(\frac{\hbar v_f \Delta_f k^2}{(\hbar v_f k)^2 + \Delta_f^2} \right) \right. \\ &\quad \left. \left[\cos[\Omega_k(t - t_0)] \frac{t^2 - t_0^2}{2} + \frac{t + 2t_0}{\Omega_k} \sin[\Omega_k(t - t_0)] + \left(-1 + \cos[\Omega_k(t - t_0)] \right) \frac{1}{\Omega_k^2} \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.61)$$

donde $\Omega_k = \frac{2}{\hbar} \sqrt{(\hbar v_f k)^2 + \Delta_f^2}$ y Λ es el límite de integración superior usando coordenadas polares para aproximar el comportamiento cercano al cono de Dirac. Obsérvese que en el caso de $t - t_0 \rightarrow \infty$ la única contribución al valor medio de la conductividad es de la forma

$$\sigma_{xy}^{\xi}(\infty) = -\xi \frac{e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\hbar v_f)^3 k \Delta_f}{2[(\hbar v_f k)^2 + \Delta_f^2]^2} = \frac{e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}} (|\Lambda_{--}^{\mathbf{k}}|^2 - |\Lambda_{+-}^{\mathbf{k}}|^2) \mathcal{F}_-^z(\mathbf{k}), \quad (4.62)$$

condiciéndose con la Ec. (4.36), ya que la diferencia de poblaciones y la curvatura de Berry en este modelo son de la forma

$$\begin{aligned} |\Lambda_{--}^{\mathbf{k}}|^2 - |\Lambda_{+-}^{\mathbf{k}}|^2 &= \frac{\hbar v_f k}{[(\hbar v_f k)^2 + \Delta_f^2]^{\frac{1}{2}}} \\ \mathcal{F}_-^z(\mathbf{k}) &= -\xi \frac{(\hbar v_f)^2 \Delta_f}{2[(\hbar v_f k)^2 + \Delta_f^2]^{\frac{3}{2}}}. \end{aligned} \quad (4.63)$$

En este caso no hay ruptura de simetría de inversión temporal y por tanto al sumar sobre el índice de valle ($\xi = \pm 1$) la respuesta Hall total se anula. Sin embargo, persiste en este modelo lo que se conoce como efecto Hall de valle. Se entiende que la respuesta proveniente de cada cono difiere del número de Chern asociado a la banda del hamiltoniano final (con un término de masa Δ_f), ya que el integrando contempla la diferencia de poblaciones entre las bandas de conducción (+) y de valencia (−) y, por tanto, no se puede escribir únicamente en términos de una curvatura. El límite adiabático total se recupera sólo si $|\Lambda_{--}^{\mathbf{k}}|^2 - |\Lambda_{+-}^{\mathbf{k}}|^2 = 1$, resultado válido en este caso para estados \mathbf{k} tales que $\hbar v_f k \gg \Delta_f$. Aún así, en el caso de un encendido súbito el resultado de integrar la Ec. (4.62) es universal, en el sentido de ser independiente del valor de la masa Δ_f del Hamiltoniano final. Se encuentra que

$$\sigma_{xy}^{\xi}(\infty) = -\xi \frac{e^2}{2h} \int_0^{\infty} \frac{(\hbar v_f)^3 k^2 \Delta_f dk}{2[(\hbar v_f k)^2 + \Delta_f^2]^2} = -\xi \frac{e^2}{h} \frac{\pi}{8} \text{sg}(\Delta_f). \quad (4.64)$$

La dinámica global descrita por la Ec. (4.61) posee términos oscilatorios con la frecuencia del gap ($2\Delta_f$) provenientes de las contribuciones infrarrojas ($k \rightarrow 0$) a la integral. Nótese que el término proporcional a $t^2 - t_0^2$ contribuye luego de realizar la integración en el cuasi-impulso cristalino con oscilaciones que cuentan con un crecimiento lineal en su amplitud. Este término proviene de los elementos no diagonales en la matriz densidad e indica la presencia de tunneling resonante entre bandas. Es de esperar que efectos de decoherencia o relajación, no considerados en este trabajo, anulen dichas contribuciones a la dinámica para tiempos suficientemente largos.

Por otra parte, si se considera un modelo donde el encendido es completamente adiabático se encuentra que la respuesta transversal está dada por

$$\sigma_{xy}^{\xi}(t) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{-\xi e^2 v_f^2}{h} \int_0^{\Lambda} \int_{-\infty}^t k t' e^{\eta t'} \cos[\gamma_{\mathbf{k}}(t, t')] [\cos[\phi_{\mathbf{k}}(t)] + \cos[\phi_{\mathbf{k}}(t')]] dk dt', \quad (4.65)$$

con $\gamma_{\mathbf{k}}(t, t') = \int_{t'}^t \Omega_{\mathbf{k}}(t'') dt''$, siendo $\Omega_{\mathbf{k}}(t) = \frac{2}{\hbar} \sqrt{(\hbar v_f k)^2 + \Delta^2(t)}$ y $\cos[\phi_{\mathbf{k}}(t)] = \frac{\Delta(t)}{\sqrt{(\hbar v_f k)^2 + \Delta^2(t)}}$. En este caso el valor medio queda definido exactamente como el número de Chern asociado a cada cono [ver Ec. (4.58)].

En las Figs. 4.2(I.a-I.b) se muestran los resultados numéricos para la conductividad

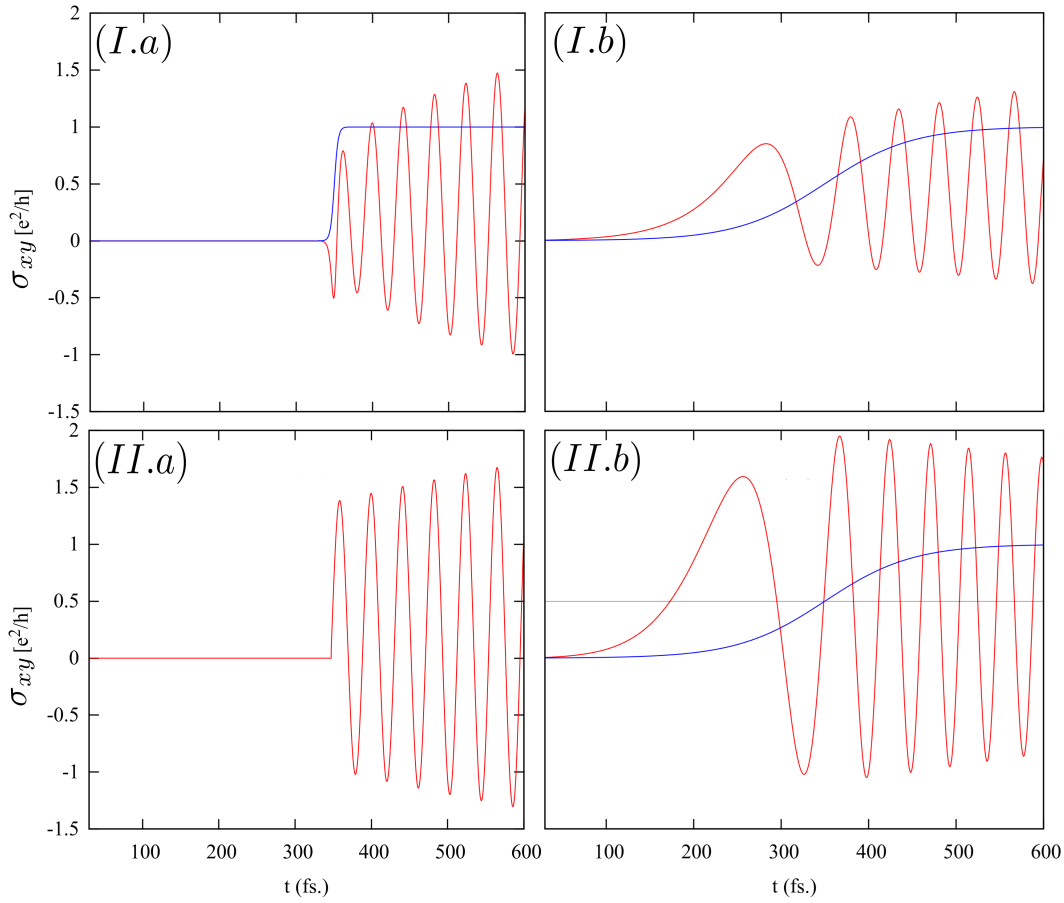


Figura 4.2: Conductividad hall en el valle \mathbf{K}' para distintos tipos de encendido $\Delta(t)\sigma_z$ indicados esquemáticamente en línea azul. (I.a)-(I.b) Resultados numéricos con $v = 0,4 \frac{1}{\text{fs}}$ y $v = 0,02 \frac{1}{\text{fs}}$, respectivamente. (II.a) Resultado analítico correspondiente a un encendido completamente súbito. (II.b) Resultado analítico correspondiente a un encendido en el límite adiabático total.

Hall correspondientes al valle \mathbf{K}' para un encendido de la forma $\Delta(t) = \frac{\Delta_f}{1+e^{-v(t-t_0)}}$ con un valor de $\Delta_f = 50 \text{ meV}$ y rampas de velocidad $v = 0,4 \frac{1}{\text{fs}}$ y $v = 0,02 \frac{1}{\text{fs}}$, respectivamente. Estos valores fueron elegidos con el fin de representar tanto el caso súbito como el adiabático con la mayor fidelidad posible. En ambos casos la respuesta oscilatoria posee una frecuencia bien definida, correspondiente al gap generado en el espectro de energías del sistema $\frac{2\Delta_f}{\hbar}$. Por otro lado, el valor medio de la oscilación depende fuertemente de la forma del pulso de “masa” utilizado, siendo más cercano a su valor adiabático ($C_{\mathbf{K}'} = \frac{1}{2}$) en el límite de rampas de velocidades pequeñas. El incremento en la amplitud de la oscilación se encuentra presente en ambos encendidos, siendo un efecto de mayor importancia en el caso de perturbaciones que se asemejen a un pulso súbito. La Fig. 4.2(II.a) se corresponde con el resultado analítico de un encendido de tipo escalón y la Fig. 4.2(II.b) con el resultado adiabático total presentado en la Ec. (4.65). Nótese que este último posee oscilaciones que decrecen en amplitud, ya que en este modelo no hay componentes fuera de la diagonal en la matriz densidad. Por otro lado, la media de la respuesta se encuentra cuantizada exactamente en un valor de $\frac{e^2}{2h}$, condiciéndose con la Ec. (4.58).

En la Fig. 4.3(a) se muestran los resultados numéricos correspondientes a un pulso de $v = 0,02 \frac{1}{\text{fs}}$ fijando distintos valores del potencial químico (en este caso, simulando un sistema dopado con huecos). La mayor contribución a la respuesta final proviene de los estados más cercanos al punto de Dirac, aquellos en donde las poblaciones de no equilibrio difieren fuertemente del caso estacionario, generando una respuesta oscilatoria enriquecida por efectos de no adiabaticidad y tunneling entre bandas.

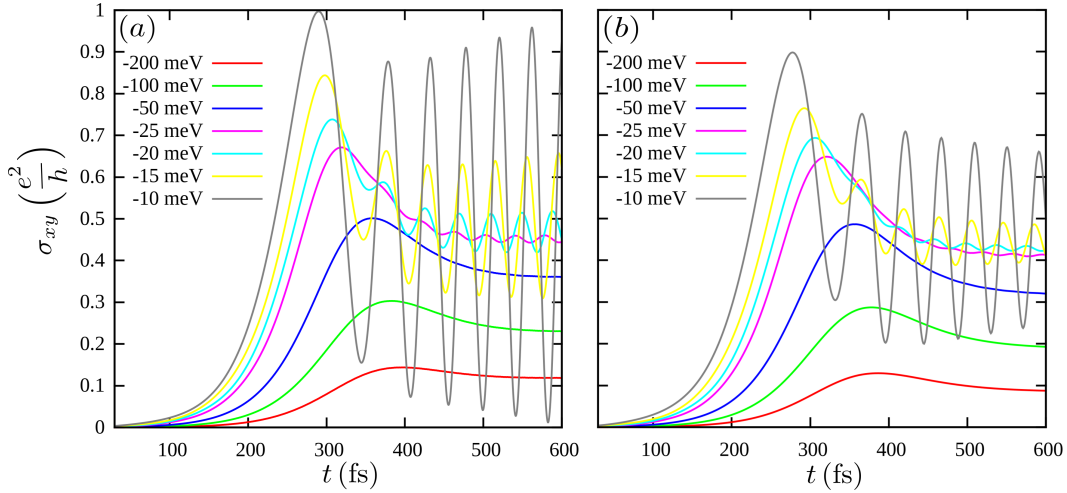


Figura 4.3: (a) Resultados numéricos de la conductividad hall en el cono \mathbf{K}' con una rampa de velocidad de encendido $v = 0,02 \frac{1}{\text{fs}}$ variando el nivel de Fermi en los valores indicados en la figura. (b) Resultados obtenidos utilizando el modelo completamente adiabático a partir de la Ec. (4.65).

En la Fig. 4.3(b) se indican comparativamente los resultados obtenidos utilizando un modelo de evolución en el límite adiabático total para las funciones de onda [ver Ec. (4.65)]. Se observa una buena correspondencia con los resultados numéricos cuando el potencial químico se encuentra más alejado de los puntos de Dirac, ya que en estados lejanos a los puntos de degeneración (*i.e.* a los gaps producidos por el encendido $\Delta(t)$) se espera un seguimiento cuasi-adiabático de los autoestados instantáneos del hamiltoniano de perturbación.

Una forma sencilla de entender los efectos de la velocidad de encendido del pulso es a través de la interpretación formal de la Ec. (4.36) con un modelo de tunneling para las poblaciones $\Lambda_{f\alpha}^{\mathbf{k}}$ descrito por una dinámica de Landau-Zener [44]. Se encuentra que a temperatura nula

$$\sigma_{xy}^{\mathbf{K}'}(\infty) = \frac{e^2}{h} \sum_{\mathbf{k}} (1 - 2P_{LZ}^{\mathbf{k}}) \mathcal{F}_-^z(\mathbf{k}) = \frac{e^2}{h} \left[\mathcal{C}_{\mathbf{K}'} - 2 \int_0^\infty e^{-\frac{\pi \Delta_{\mathbf{k}}^2}{4\hbar v_{LZ}}} \mathcal{F}_-^z(k) k dk \right], \quad (4.66)$$

donde $\Delta_{\mathbf{k}} = 2\hbar v_f k$ y $v_{LZ} = \Delta_f v / 2 = \dot{\Delta}(t = t_0)$, aproximando la perturbación como una rampa lineal de masa. Realizando el cambio de variables $r = k^2$, la discrepancia del valor asintótico medio con el invariante topológico se puede expresar como un desarrollo

en serie en el parámetro $\nu = \frac{v\Delta_f}{\hbar v_f^2}$ mediante integración por partes:

$$\delta_{xy} = \frac{e^2}{h} \mathcal{C}_{\mathbf{K}'} - \sigma_{xy}(\infty) = \frac{e^2}{h} \int_0^\infty \mathcal{F}_-^z(r) e^{-\frac{r}{\nu}} dr = \frac{e^2}{h} \left[\nu \mathcal{F}_-^z(0) + \nu^2 \mathcal{F}_-^{z'}(0) + \nu^3 \mathcal{F}_-^{z''}(0) + \dots \right] \quad (4.67)$$

Si se mantiene únicamente el orden lineal en la velocidad de encendido, utilizando la expresión (2.29) para la curvatura de Berry, se obtiene

$$\delta_{xy} = \frac{e^2}{h} \left[\frac{\hbar v}{4\pi|\Delta_f|} + \mathcal{O}\left(\frac{v^2}{|\Delta_f|^2}\right) \right], \quad (4.68)$$

es decir $\lim_{v \rightarrow 0} \sigma_{xy}^{\mathbf{K}'}(\infty) = \frac{e^2}{h} \mathcal{C}_{\mathbf{K}'} = \frac{e^2}{2h}$.

4.7. Resultados de la respuesta Hall en grafeno irradiado.

En el caso del sistema irradiado las excitaciones producto de la perturbación se encuentran presentes en todas las zonas de degeneración en el espectro de cuasi-energías, es decir, en todos aquellos $k_n = \frac{n\Omega}{2v_f}$ con $n = 0, 1, 2$, etc. Una magnitud de relevancia a tener en cuenta en el cálculo de las propiedades de transporte con este formalismo es la ocupación en las bandas de Floquet $|\langle \psi_{\mathbf{k}}(t) | \phi_{\mathbf{k}}^\alpha(t) \rangle|^2$, donde $\psi_{\mathbf{k}}(t)$ es la función de onda evolucionada a través del cálculo completo del propagador y $\phi_{\mathbf{k}}^\alpha(t)$ es la función de onda de Floquet asociada a la band α . Esta ocupación se modifica en forma no trivial a lo largo de la evolución. Si se proyectan las poblaciones en el esquema de zona reducida en distintos tiempos de un pulso gaussiano se obtienen resultados como el observado en la Fig. 4.4.

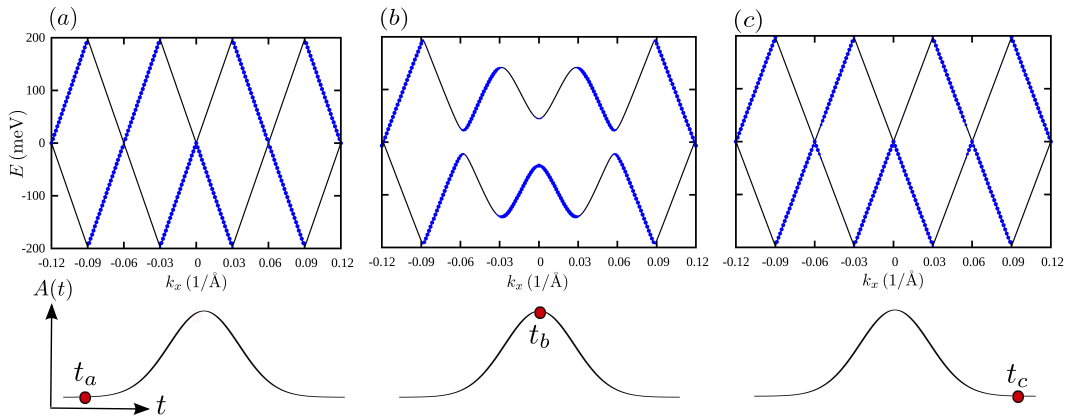


Figura 4.4: Espectro de Floquet en la zona reducida y probabilidades de ocupación en distintos tiempos a lo largo de un pulso gaussiano con polarización circular. Las probabilidades de ocupación en las bandas de Floquet se indican en círculos cuya área es proporcional a las mismas.

Las probabilidades de ocupación en las bandas de Floquet se indican con círculos cuyo área es proporcional a las mismas. En los estados \mathbf{k} lejanos a los puntos de degeneración se observa un seguimiento cuasi-adiabático del estado de Floquet, a diferencia de los efectos de tunneling existentes en los cruces de bandas. Al finalizar el pulso (tiempo t_c) se observa que quedan todavía excitaciones par electrón-hueco. Éstas dejarían de estar presentes si se incluyeran procesos de relajación en la dinámica de la función de onda y si el tiempo de relajación fuera suficientemente corto. Un encendido de tipo gaussiano reduce la anisotropía existente en el caso de encendidos completamente súbitos, como el esquematizado en la Fig. 4.5. Esto se debe a que el campo electromagnético en este último caso se encuentra en una dirección preferencial en el momento en que se genera la perturbación, rompiendo la simetría $k \rightarrow -k$. En el caso de un pulso con dependencia funcional analítica suave como una gaussiana este efecto se reduce, siendo formalmente equivalente a promediar en el tiempo t_0 de encendido o en la fase inicial del campo electromagnético. Se opta en lo que sigue del trabajo mantener este último tipo de pulso como perturbación, ya que si bien un encendido súbito es más accesible desde el punto de vista analítico, se encuentra más alejado de un posible correlato experimental.

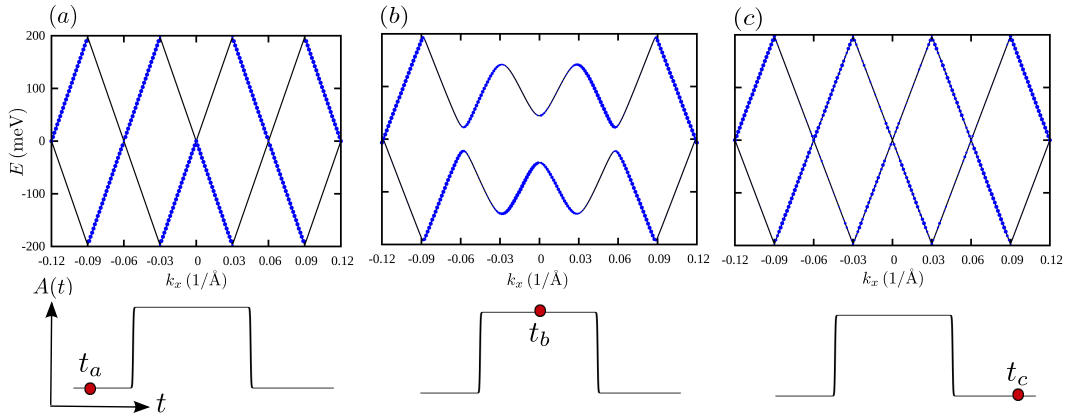


Figura 4.5: Espectro de Floquet en la zona reducida y probabilidades de ocupación en distintos tiempos a lo largo de un pulso cuadrado con polarización circular. Las probabilidades de ocupación en las bandas de Floquet se indican en círculos cuya área es proporcional a las mismas.

Las excitaciones generadas se ven reflejadas en la dependencia de la correlación corriente-corriente para los distintos cuasi-impulsos cristalinos a lo largo del tiempo $\sigma_{xy}^{\mathbf{k}}(t)$, es decir el *kernel* de la integral en la zona de Brillouin de la Ec. (4.17). En las Fig. 4.6 y 4.7 se muestra esa correlación con valores normalizados a la unidad para polarización lineal a lo largo del eje \hat{x} y circular, respectivamente. El potencial químico se encuentra en el punto de Dirac, es decir, $\varepsilon_F = 0$.

Previo a la llegada del pulso el sistema se encuentra en la fase topológicamente trivial, produciéndose la anulación de la σ_{xy} al integrar angularmente en la zona de Brillouin debido a la simetría cuadrupolar de la correlación. La misma se debe al

término proporcional al tiempo de la Ec. (4.23), que involucra derivadas cruzadas de la relación de dispersión, traducándose en esta dependencia angular donde $\sigma_{xy}^{\mathbf{k}}(-\infty) \propto \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \sin(\theta_{\mathbf{k}})$.

Notar que en el caso de luz linealmente polarizada (Fig. 4.6), donde no se genera un gap efectivo en el espectro de cuasi-energías, se ven claramente las cancelaciones debido a signos opuestos en las correlaciones. El resultado de integrar en toda la zona en este caso es nulo para todo tiempo. Este efecto es debido a que la polarización lineal no viola la simetría de inversión temporal \mathcal{T} y por tanto la conductancia transversal se mantiene nula, aún en presencia del pulso.

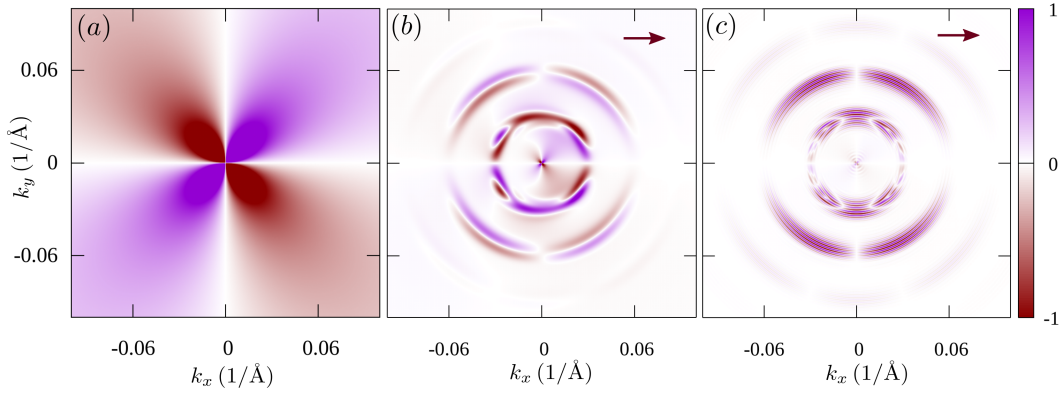


Figura 4.6: Correlación corriente-corriente para los distintos cuasi-impulsos cristalinos $\sigma_{xy}^{\mathbf{k}}(t)$ bajo radiación con polarización lineal para distintos tiempos: (a) anterior a la llegada del pulso, (b) en el tiempo medio de la gaussiana y (c) posterior al pulso.

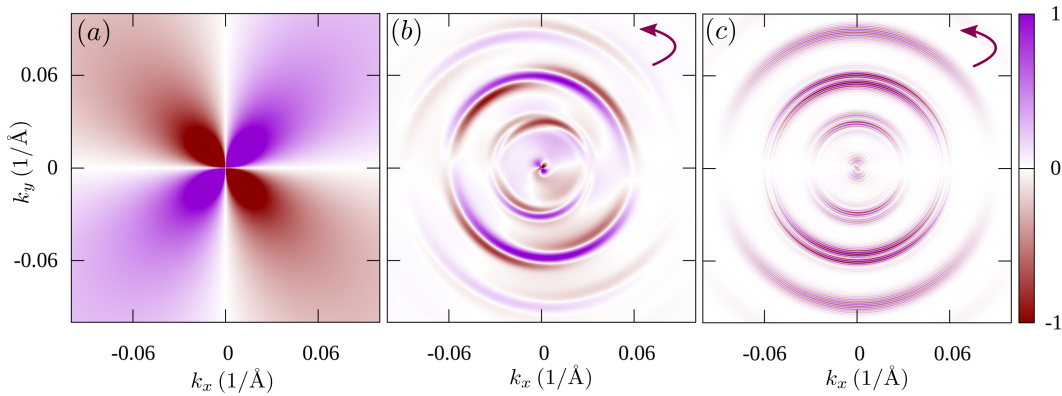


Figura 4.7: Correlación corriente-corriente para los distintos cuasi-impulsos cristalinos $\sigma_{xy}^{\mathbf{k}}(t)$ bajo radiación con polarización circular para distintos tiempos: (a) anterior a la llegada del pulso, (b) en el tiempo medio de la gaussiana y (c) posterior al pulso.

Por otro lado, en el caso de la luz circularmente polarizada (Fig. 4.7), se espera que el resultado de la integración de las correlaciones alrededor de los puntos de Dirac sea no nulo, debido a la ruptura de simetría de inversión temporal. Se observa que las contribuciones más relevantes son aquellas provientes de todos los estados \mathbf{k} cercanos a los anticruces en el espectro de cuasi-energías de Floquet.

Con el fin de analizar separadamente cada contribución, se calculó la conductividad Hall dinámica integrando la respuesta en un rango de estados \mathbf{k} alrededor de los distintos anti-cruces en el espectro de Floquet. En las Figs. 4.8 y 4.9 se muestran dichas respuestas para el caso de un pulso gaussiano centrado en 200 fs con un ancho temporal de $\sigma = 50$ fs, una intensidad máxima de radiación de $ev_f A_0 = 140$ meV y energías del fotón incidente de $\hbar\Omega = 400$ meV y $\hbar\Omega = 800$ meV, respectivamente. El potencial químico se encuentra en ambos casos en $\varepsilon_F = 0$.

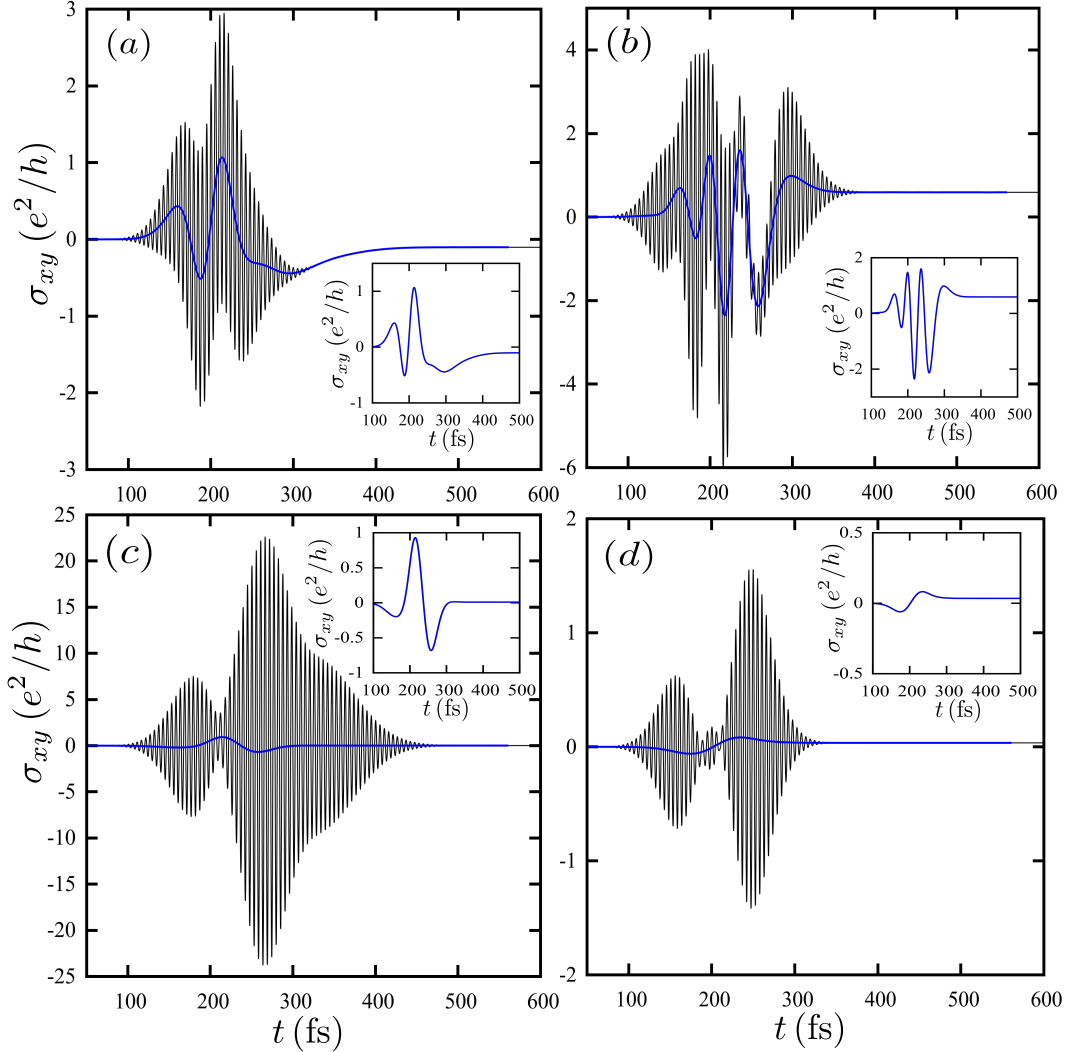


Figura 4.8: Respuesta temporal de la conductividad Hall del valle \mathbf{K} integrada proveniente de cada uno de los anti-crossings con su correspondiente media: (a) Punto de Dirac $k = 0$, (b) Gap dinámico $k = k_0 = \Omega/2v_f$, (c) $k = 2k_0$ y (d) $k = 3k_0$. El potencial químico fue fijado en 0 eV. Se utilizó en este caso un pulso gaussiano centrado en 200 fs con un ancho de $\sigma = 50$ fs, siendo la energía del fotón incidente de $\hbar\Omega = 400$ meV.

La señal presente un fuerte carácter oscilatorio con una frecuencia predominante de 2Ω . En cada caso se muestra la dependencia oscilatoria de la señal de baja frecuencia al filtrar la frecuencia rápida. Esta última posee oscilaciones asociadas a los gaps generados en el espectro de cuasi-energías de Floquet. En efecto, en las Figs. 4.8(a) y 4.9(a) la misma se encuentra en correspondencia con un término de masa inversamente

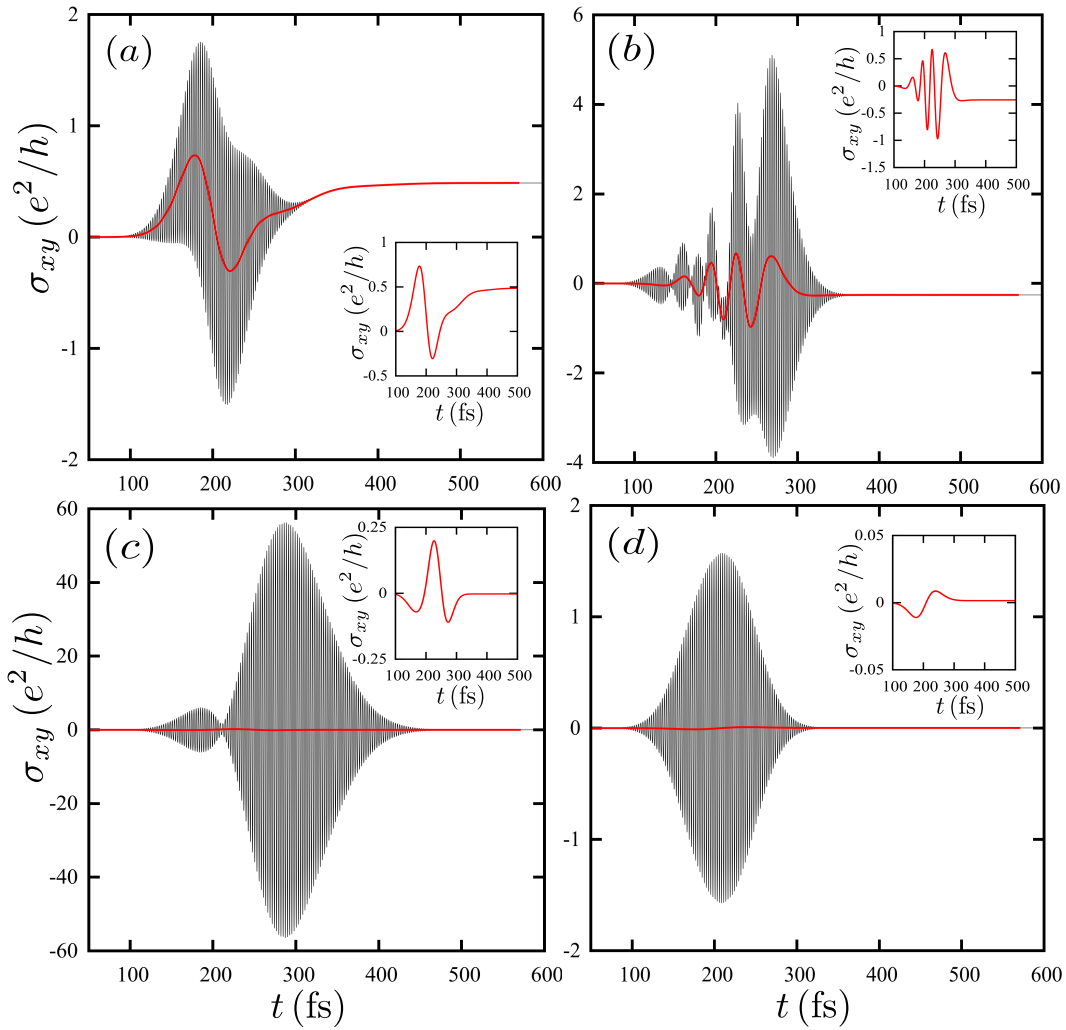


Figura 4.9: Respuesta temporal de la conductividad Hall del valle \mathbf{K} integrada proveniente de cada uno de los anti-crossings con su correspondiente media: (a) Punto de Dirac $k = 0$, (b) Gap dinámico $k = k_0 = \Omega/2v_f$, (c) $k = 2k_0$ y (d) $k = 3k_0$. El potencial químico fue fijado en 0 eV. Se utilizó en este caso un pulso gaussiano centrado en 200 fs con un ancho de $\sigma = 50$ fs, siendo la energía del fotón incidente de $\hbar\Omega = 800$ meV.

proporcional a la frecuencia del fotón incidente y cuadrático con la amplitud de la radiación: $(ev_f A_0)^2/\hbar\Omega$. En las Figs. 4.8(b) y 4.9(b) se puede observar la contribución del gap dinámico existente en el borde de zona ($\hbar\Omega/2$), con una oscilación característica asociada a un gap lineal con la intensidad máxima de la radiación $ev_f A_0$. A medida que Ω aumenta, la aproximación hecha para el cálculo de esta brecha es más adecuada, ya que se alcanza un límite de acoplamiento débil donde el parámetro $\eta = \frac{ev_f A_0}{\hbar\Omega} \rightarrow 0$.

Por otro lado, se observa que las contribuciones al valor medio de la señal provenientes del resto de los gaps (Figs. 4.8(c,d) y 4.9(c,d)) se hacen cada vez menores. Este comportamiento se condice con el hecho de que el peso de la función de onda en las réplicas involucradas en la generación de dichas brechas en el espectro sea cada vez menor al aumentar la frecuencia de excitación. Notablemente, la media de la respuesta Hall no se encuentra determinada únicamente por los estados cercanos al nivel de

Fermi, es decir, los puntos \mathbf{k} cercanos a los valles de Dirac. Éste sería el caso si las funciones de onda pudieran seguir adiabáticamente a los estados de Floquet. La presencia de excitaciones par electrón-hueco en el resto de los gaps dinámicos invalida esta idea.

4.7.1. Respuesta Hall en los puntos de Dirac con $\varepsilon_F = 0$.

El caso particular de la degeneración en los valles \mathbf{K} y \mathbf{K}' el formalismo de dos tiempos que se introdujo en el Cap. 2 es idóneo para el cálculo de la respuesta dinámica en valor medio. De hecho, estas son las únicas degeneraciones en donde la evolución de los estados de Floquet no posee naturalmente términos oscilatorios, ya que el gap es generado entre dos estados pertenecientes a la réplica con número de fotones $n = 0$. En efecto, en la Ec. (2.42) se introdujo un propagador del tiempo lento $U_{\text{eff}}(\tau, -\infty)$ para simular la evolución unitaria de estos estados. Por otro lado, la ocupación de los estados involucrados para $A(-\infty) = 0$, es decir antes del encendido de la perturbación, coincide con la del estado fundamental de Floquet asociado a la cuasi-energía negativa, como se puede ver en la Fig. 4.4(a). Si la energía de excitación de los fotones incidentes se elige de forma tal que $\hbar\Omega > W$, siendo W el ancho de banda característico del material, ésta es la única degeneración que producirá contribuciones a la conductancia transversal. El valor obtenido para un encendido súbito de radiación con amplitud A_0 en este último caso estará dado por la Ec. (4.64), donde se debe tomar $\Delta_f = \Delta_f^\xi = -\xi \frac{[ev_f A_0]^2}{\hbar\Omega}$:

$$\sum_{\xi} \sigma_{xy}^{\xi} = \frac{\pi}{4} \frac{e^2}{h} = 0,785 \frac{e^2}{h} \quad (4.69)$$

En la referencia [12] se muestra, en el caso de un encendido súbito, un valor asintótico de la respuesta media en función de la frecuencia de radiación Ω . Se encuentra que para frecuencias del fotón cada vez mayores la misma se acerca al valor obtenido en la Ec. (4.69). El modelo sencillo expuesto en esta tesis es consistente con dichos resultados.

Recientemente se ha estudiado la posibilidad de obtener una ocupación adiabática de los estados de borde topológicos generados en estos valles al irradiar nano-cintas de grafeno [45], encontrando que el límite de ocupación ideal no es posible de alcanzar. Sin embargo, esto no impide que para encendidos suficientemente adiabáticos, la ocupación final luego de la evolución se acerque al estado fundamental de Floquet, difiriendo del mismo debido a las contribuciones infrarrojas cercanas a los puntos de degeneración.

Si se utilizan las funciones de onda de la Ec. (2.43) obtenidas a través de la transformación canónica del Hamiltoniano dependiente del tiempo para el cálculo de las correlaciones corriente-corriente se encuentra que

$$\sigma_{xy}(t) = \frac{e^2 v_f^2}{i\hbar} \sum_{\mathbf{k}\alpha} \int_{-\infty}^t \langle \mathbf{k}\alpha | \mathcal{C}_{\mathbf{k}}(t, t') | \mathbf{k}\alpha \rangle \mathcal{W}(t') dt', \quad (4.70)$$

con

$$\begin{aligned}
C_{\mathbf{k}}(t, t') = & \left(1 - \eta^2(t) - \eta^2(t')\right) [\xi \sigma_x^{\text{eff}}(t), \sigma_y^{\text{eff}}(t')] - 2\xi \eta(t) \cos(\Omega t) [\sigma_z^{\text{eff}}(t), \sigma_y^{\text{eff}}(t')] \\
& - 2\xi \eta(t') \sin(\Omega t') [\xi \sigma_x^{\text{eff}}(t), \sigma_z^{\text{eff}}(t')] + 4\eta(t)\eta(t') \cos(\Omega t) \sin(\Omega t') [\sigma_z^{\text{eff}}(t), \sigma_z^{\text{eff}}(t')] \\
& + \eta^2(t') \left(i e^{2i\Omega t'} [\xi \sigma_x^{\text{eff}}(t), \sigma_-^{\text{eff}}(\xi, t')] - i e^{-2i\Omega t'} [\xi \sigma_x^{\text{eff}}(t), \sigma_+^{\text{eff}}(\xi, t')] \right) \\
& - \eta^2(t) \left(e^{2i\Omega t} [\sigma_-^{\text{eff}}(\xi, t), \sigma_y^{\text{eff}}(t')] + e^{-2i\Omega t} [\sigma_+^{\text{eff}}(\xi, t), \sigma_y^{\text{eff}}(t')] \right),
\end{aligned} \tag{4.71}$$

donde se usa como notación que los operadores $\mathcal{O}^{\text{eff}}(t) = U_{\text{eff}}(t_0, t) \mathcal{O} U_{\text{eff}}^\dagger(t, t_0)$, es decir, se encuentran en la representación de interacción generalizada con el operador de evolución efectivo definido en la Ec. (2.42).

Es posible mostrar que debido al hecho de que la perturbación efectiva se encuentra únicamente en σ_z , todos los términos que involucran $[\sigma_z^{\text{eff}}(t), \sigma_{x,y}^{\text{eff}}(t')]$ se anulan al integrar angularmente en la zona de Brillouin. Esto último es factible de entender realizando una rotación

$$R(\theta_{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} e^{\frac{i\theta_{\mathbf{k}}}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\frac{i\theta_{\mathbf{k}}}{2}} \end{pmatrix} \tag{4.72}$$

sobre los espinores de Dirac, haciendo que los mismos sean autoestados del operador σ_x . La misma transformación se debe aplicar tanto a los operadores evolución como a los operadores corriente. En particular, el hamiltoniano efectivo adquiere la forma

$$\tilde{H}_{\text{eff}}(k) = R(\theta_{\mathbf{k}}) H_{\text{eff}}(k, \theta_{\mathbf{k}}) R^\dagger(\theta_{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} \Delta(\xi, t) & k \\ k & -\Delta(\xi, t) \end{pmatrix}, \tag{4.73}$$

y por tanto el correspondiente operador evolución es en esta base independiente del ángulo $\theta_{\mathbf{k}}$. Por otro lado, únicamente las matrices de Pauli $\sigma_{x,y}$ se encuentran alteradas por la rotación:

$$\begin{aligned}
\tilde{\sigma}_x(\theta_{\mathbf{k}}) &= \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \sigma_x + \sin(\theta_{\mathbf{k}}) \sigma_y \\
\tilde{\sigma}_y(\theta_{\mathbf{k}}) &= -\sin(\theta_{\mathbf{k}}) \sigma_x + \cos(\theta_{\mathbf{k}}) \sigma_y.
\end{aligned} \tag{4.74}$$

Teniendo esto último en consideración, todos los elementos de matriz de la forma

$$\begin{aligned}
& \int_0^{2\pi} \langle \mathbf{k}\alpha | [\sigma_z^{\text{eff}}(t), \sigma_{x,y}^{\text{eff}}(t')] | \mathbf{k}\alpha \rangle d\theta_{\mathbf{k}} = \\
& \int_0^{2\pi} \langle \mathbf{k}\alpha | R^\dagger(\theta_{\mathbf{k}}) [\sigma_z^{\text{eff}}(t), R(\theta_{\mathbf{k}}) \sigma_{x,y}^{\text{eff}}(t') R^\dagger(\theta_{\mathbf{k}})] R(\theta_{\mathbf{k}}) | \mathbf{k}\alpha \rangle d\theta_{\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{4.75}$$

se anulan. Los términos con contribuciones no nulas de la Ec. (4.71) se pueden escribir

de forma más compacta como

$$\begin{aligned}
 C_{\mathbf{k}}(t, t') = & \left\{ 1 - \eta^2(t) \left(1 + \cos(2\Omega t) \right) - \eta^2(t') \left(1 - \cos(2\Omega t') \right) \right\} [\xi \sigma_x^{\text{eff}}(t), \sigma_y^{\text{eff}}(t')] \\
 & - \eta^2(t') \sin(2\Omega t') [\sigma_x^{\text{eff}}(t), \sigma_x^{\text{eff}}(t')] - \eta^2(t) \sin(2\Omega t) [\sigma_y^{\text{eff}}(t), \sigma_y^{\text{eff}}(t')] + \\
 & 4\eta(t)\eta(t') \sin(\Omega t') \cos(\Omega t) [\sigma_z^{\text{eff}}(t), \sigma_z^{\text{eff}}(t')] + \text{términos no contribuyentes.}
 \end{aligned} \tag{4.76}$$

De esta última expresión es posible notar que al realizar la integral de la Ec. (4.70) sólo sobrevivirán oscilaciones con 2Ω en el resultado final. La señal con esta frecuencia rápida filtrada es factible de calcular mediante las corrientes expresadas en la representación de interacción con la evolución efectiva de un término de masa, es decir, la función de correlación de baja frecuencia $\tilde{C}_{\mathbf{k}}(t, t')$ será:

$$\tilde{C}_{\mathbf{k}}(t, t') = \left(1 - \eta^2(t) - \eta^2(t') \right) [\xi \sigma_x^{\text{eff}}(t), \sigma_y^{\text{eff}}(t')]. \tag{4.77}$$

En la Fig. 4.10(a) se muestra la concordancia entre ambos resultados (la oscilación de baja frecuencia del cálculo numérico total y la aproximación efectiva del encendido de masa) para un pulso gaussiano con 50fs de ancho mitad. La ventana de integración tomada para extraer la respuesta es entre estados $k = [0, \frac{k_0}{2}]$. En la Fig. 4.10(b) se utilizó una frecuencia mayor y un pulso cuya envolvente satura. En este caso se puede observar con claridad la oscilación de la media con un período característico determinado por el gap efectivo al tiempo de saturación: $2\Delta(t_s) = \frac{2[ev_f A(t_s)]^2}{\hbar\Omega}$.

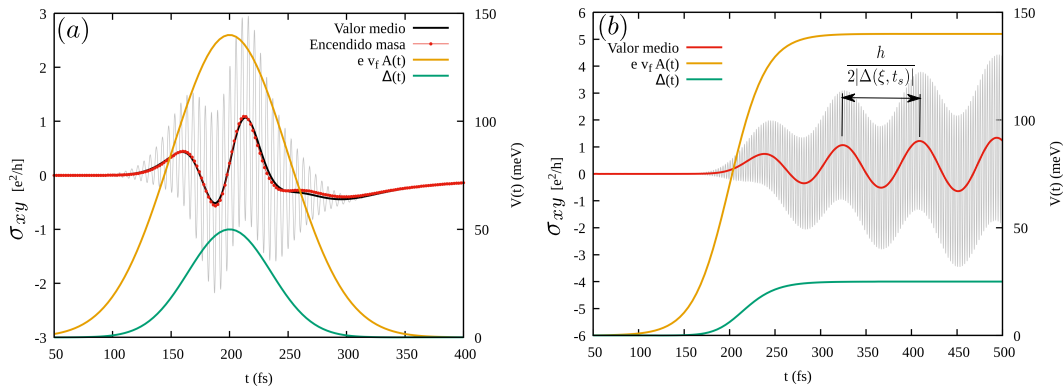


Figura 4.10: (a) Contribución a la conductividad Hall de los estados alrededor del valle \mathbf{K} $\hbar\Omega = 400$ meV junto con su valor medio, la línea con puntos se corresponde al cálculo de la media con un término de masa efectivo. (b) Contribución a la conductividad Hall de los estados alrededor del valle \mathbf{K} $\hbar\Omega = 800$ meV junto con su valor medio.

La media de la respuesta total, extrayendo las oscilaciones características del tiempo lento asociadas a las cuasi-energías del espectro de Floquet, depende fuertemente del tipo de pulso elegido y de la energía del fotón incidente. En efecto, pulsos con misma energía pico $ev_f A_0$ y ancho mitad cada vez mayores se corresponden con resultados más cercanos al límite adiabático. Asimismo, energías $\hbar\Omega$ mayores no sólo

contribuyen a disminuir el peso en la función de onda de estados en réplicas de orden superior sino también a generar mayores gaps efectivos en el borde de zona. Este último efecto reduciría en principio las contribuciones provenientes del gap dinámico para $\varepsilon_F = 0$, ya que de la Ec. (2.12) los efectos de tunneling son inversamente proporcionales a $\varepsilon_\beta(\tau) - \varepsilon_\alpha(\tau) = \hbar\Omega - ev_f A(\tau)$ a primer orden en la perturbación.

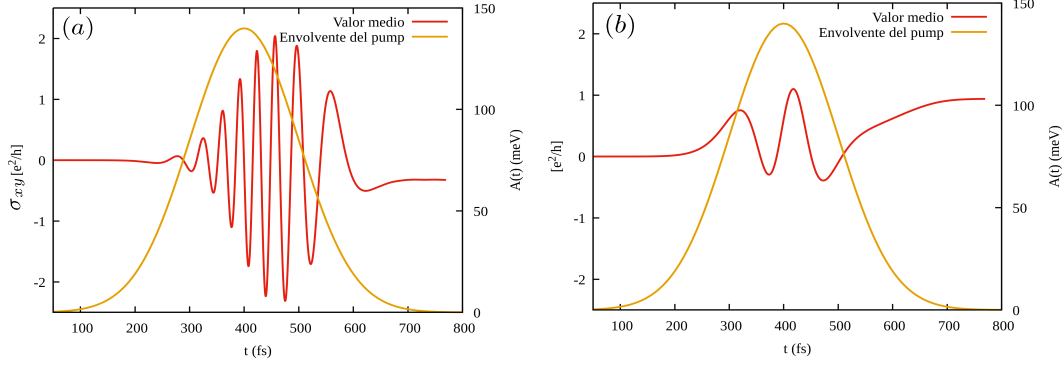


Figura 4.11: Contribución a la media de la conductividad Hall de los estados alrededor del gap dinámico $k = k_0 = \frac{\Omega}{2v_f}$ (a) y alrededor del punto de Dirac (b) en el valle \mathbf{K} para $\varepsilon_F = 0$ con una energía del fotón incidente de $\hbar\Omega = 800$ meV. La envolvente utilizada para el pulso es gaussiana con un ancho mitad de 100 fs

En la Fig. 4.11 se muestran las oscilaciones de la conductividad Hall provenientes del gap dinámico y del punto de Dirac en el valle \mathbf{K} y con el potencial químico fijado en $\varepsilon_F = 0$ filtrando previamente las oscilaciones del tiempo rápido. En este caso se utilizó una envolvente gaussiana con desviación $\sigma = 100$ fs. Nótese que la respuesta proveniente del gap dinámico [4.11(a)] se mantiene con una media cercana a cero para tiempos suficientemente cortos, donde $\dot{A}(\tau) \approx 0$, pero a tiempos mayores comienza a tener una contribución finita. Por otro lado, la respuesta del punto de Dirac [4.11(b)] se acerca a su valor adiabático $\simeq C_{k=0} = \frac{1}{2}$. Es importante notar el cambio de signo en el valor medio de la respuesta oscilatoria en ambos gaps, debido a la velocidad opuesta de los estados quirales de borde en los mismos. Efectivamente, para pulsos menos adiabáticos las contribuciones del gap resonante en k_0 se hacen relevantes, llegando a obtener durante el pulso una media como respuesta total que no sólo difiere del valor asociado al punto de Dirac sino que también posee otro signo.

4.7.2. Respuesta Hall en el gap dinámico $k_0 = \frac{\Omega}{2v_f}$.

Si el potencial químico se fija en $\varepsilon_F = -\frac{\hbar\Omega}{2}$ se esperaría obtener en el límite adiabático total una respuesta en cada valle cuya media se acerque al resultado de la Ec. (2.27), es decir, al número de estados de borde en cada cono $C_{k_0} = -1$. En la Fig. 4.12 se muestran los resultados de la contribución a la conductividad Hall proveniente de este gap cuando el potencial químico se encuentra en el borde de la primera zona de Floquet para dos tipos de pulsos. Es posible observar que la respuesta obtenida tanto con un

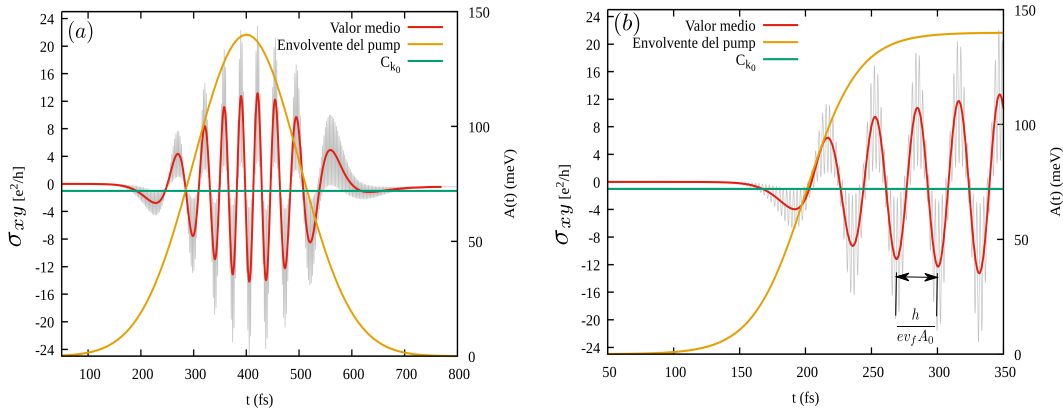


Figura 4.12: Contribución a la conductividad Hall de los estados alrededor del gap dinámico $k = k_0 = \frac{\Omega}{2v_f}$ en el valle \mathbf{K} para $\varepsilon_F = -\frac{\hbar\Omega}{2}$ con una energía del fotón incidente de $\hbar\Omega = 800$ meV junto con su valor medio. En ambos casos se indica la contribución al Chern proveniente de estos gaps del cálculo analítico $C_{k_0} = -1$. En el panel (a) la envolvente del pulso utilizado es gaussiana con un ancho mitad de 100 fs y una energía pico de $ev_f A_0 = 140$ meV y en el panel (b) se elige un envolvente que satura a este mismo valor de energía con una velocidad de encendido.

pulso gaussiano [Fig. 4.12(a)] como con un pulso cuya envolvente satura [Fig. 4.22(b)] posee una frecuencia de oscilación característica del gap de Floquet $ev_f A_0$ con una media muy cercana al invariante topológico asociado a esta región del espectro. El hecho de que la oscilación correspondiente al tiempo lento se encuentre en concordancia con el gap de Floquet es posible de entender a través del formalismo de dos tiempos. La función de onda se encuentra en una superposición de los autoestados instantáneos del operador de Floquet y por tanto la respuesta oscila con la diferencia de fases dinámicas de los mismos.

El valor medio del resultado se condice con lo obtenido en la referencia [29], donde se estudió la respuesta Hall en grafeno con una configuración multi-terminal en el caso estacionario y utilizando el formalismo de scattering de Floquet. La respuesta del gap de Dirac y del gap dinámico posee una diferencia de signo debido a que los estados quirales de borde poseen velocidades opuestas en ambos. Modificando la quiralidad de la radiación el signo de la conductividad Hall se invierte.

Si se quisiera realizar un procedimiento análogo al del gap del valle de Dirac para comprender la dinámica del tiempo lento en un subespacio reducido de réplicas se deberían utilizar las funciones de onda de la Ec. (2.26) como aquellas que resulten de una evolución adiabática de los estados originales. Sin embargo, las mismas no son autoestados del operador de Floquet original, sino de un operador modificado. En efecto, mantener únicamente los modos que difieren en $|\Delta n| = 1$ en los autoestados de Floquet para una amplitud de radiación constante A_0 equivale a pedir que

$$\begin{aligned}
 &(\tilde{H}_{\mathbf{k}}(t) - i\hbar\partial_t) |\psi_{\mathbf{k}\pm}(t)\rangle = \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\pm} |\psi_{\mathbf{k}\pm}(t)\rangle \\
 &\tilde{H}_{\mathbf{k}}(t) = H_0(\mathbf{k}) + \frac{ev_f A_0}{2} \begin{pmatrix} -\cos(\theta_{\mathbf{k}} - \Omega t) & ie^{i\theta_{\mathbf{k}}} \sin(\theta_{\mathbf{k}} - \Omega t) \\ -ie^{-i\theta_{\mathbf{k}}} \sin(\theta_{\mathbf{k}} - \Omega t) & \cos(\theta_{\mathbf{k}} - \Omega t) \end{pmatrix}, \quad (4.78)
 \end{aligned}$$

donde $|\psi_{\mathbf{k}\pm}(t)\rangle$ son las funciones de onda aproximadas de la Ec. (2.26) y $\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\pm}$ las cuasienergías en el mismo orden [Ec. (2.25)]. El hamiltoniano modificado $\tilde{H}_{\mathbf{k}}(t)$ es aquel que descompuesto en la base de modos y escrito en la base que diagonaliza el hamiltoniano original $H_0(\mathbf{k})$ toma la forma

$$\begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ \dots & \hbar v_f k & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & -\hbar v_f k & -\frac{e v_f A_0}{2} e^{-i\theta_{\mathbf{k}}} & 0 & \dots \\ \dots & 0 & -\frac{e v_f A_0}{2} e^{i\theta_{\mathbf{k}}} & \hbar v_f k - \hbar \Omega & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & 0 & -\hbar v_f k - \hbar \Omega & \dots \\ \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (4.79)$$

Notablemente, el cálculo numérico de la conductividad Hall con una evolución de los estados alrededor de k_0 descrita por $\tilde{H}_{\mathbf{k}}(t)$ (utilizando una forma funcional no trivial para el pulso de excitación $A_0 \rightarrow A(t)$) posee una media nula para todo tiempo, no concidiéndose con los resultados del cálculo completo. Sin embargo, sabemos que la contribución a la curvatura de Berry proveniente de estos gaps se encuentra bien descrita por esta aproximación [ver Ec. (2.27)] y la misma es la que entra en juego para definir la media de la respuesta, al menos en el caso de un encendido súbito [ver Ec. (4.51)]. Esta aparente contradicción surge de la no correspondencia entre los operadores corriente asociados al hamiltoniano original $-\frac{e}{\hbar} \nabla H_0(\mathbf{k}, t)$ con aquellos que provienen del hamiltoniano modificado $-\frac{e}{\hbar} \nabla \tilde{H}_{\mathbf{k}}(t)$. En efecto, la relación existente entre la curvatura de Berry (que involucra gradientes de las funciones de onda de Floquet) y las corrientes electrónicas sólo es válida si la función de onda aproximada verifica la Ec. (4.41) con $\varepsilon_{\mathbf{k}\gamma} \rightarrow \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}\gamma}$ y la Ec. (4.42) con $\nabla_{\mathbf{k}} H_0(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \tilde{H}_{\mathbf{k}}(t)$. El único gap del espectro de Floquet aproximado al orden más bajo no trivial con un hamiltoniano efectivo que verifica estas condiciones es el del valle de Dirac. En el resto de los gaps dinámicos, si bien estas aproximaciones en subespacios restringidos son buenas para describir tanto el espectro de Floquet como las contribuciones al número de Chern, las correlaciones corriente-corriente que entran en juego para la determinación de la conductancia Hall no se encuentran bien descritas, siendo necesario incluir una mayor cantidad de modos en la evolución temporal determinada por la Ec. (2.16).

Capítulo 5

Conclusiones

En el trabajo expuesto en esta tesis se simuló experimentos de *pump & probe* en sistemas de tipo grafeno. Los mismos presentan propiedades topológicas de interés al ser irradiados con luz circularmente polarizada, como ser la aparición de gaps dinámicos en su espectro de cuasi-energías y una curvatura de Berry no nula. La ruptura de simetría de inversión temporal, que en ciertos casos conlleva la aparición de propiedades topológicas no triviales, fue estudiada a través de simulaciones de fotoemisión resuelta en tiempo (tr-ARPES) (Cap. 3) y cálculos de conductividad Hall utilizando el formalismo de respuesta lineal (Cap. 4).

A través de las simulaciones de fotoemisión se encontró que la estructura de bandas que revelan los espectros se corresponde con fidelidad a la relación de dispersión de cuasi-energías de Floquet, característica de sistemas irradiados en forma estacionaria, incluso en las escalas temporales características de pulsos gaussianos. Por otro lado, se calcularon y tuvieron en consideración los elementos de matriz que brindan las reglas de selección del acoplamiento del sistema electrónico con la radiación. Se encontró que la distribución angular de intensidades, producto de estos últimos, revela información acerca de las fases de las funciones de onda de Bloch. Se estudiaron además sistemas donde existe previamente una ruptura de simetría de inversión, como el de una red hexagonal con diferentes energías de sitio en sus subredes (hamiltoniano de Dirac con término de masa) o una bicapa de grafeno sometida a una diferencia de potencial externo, donde existe una transición de fase topológica al superar un cierto valor crítico del campo de excitación. Se pudo comprobar que existe la posibilidad de sensar este estado no trivial y la transición midiendo únicamente las propiedades de volumen a través de este tipo de mediciones espectroscópicas en escalas temporales de \sim fs. La inversión de la textura de pseudo-espín en ciertos cuasi-impulsos de la primera zona de Brillouin es factible de detectar utilizando pulsos de sondeo que permitan generar efectos de interferencia en los elementos de matriz dipolares provenientes de distintas direcciones.

Por otro lado, los cálculos de la respuesta Hall en sistemas sometidos a perturbaciones externas dependientes del tiempo muestran que la conductancia es no trivial al romper la simetría de inversión temporal en forma dinámica utilizando pulsos láser con polarización circular. Se encontró una respuesta fuertemente oscilatoria, con componentes de Fourier que reflejan la estructura de gaps asociados a las bandas de Floquet, característicos de una perturbación estacionaria. Sin embargo, el valor medio de la respuesta oscilatoria no se encuentra cuantizado, ya que depende fuertemente de las poblaciones finales de los estados y por ende del tipo de encendido. La topología del hamiltoniano instantáneo se puede manifestar en la respuesta de *bulk* fuera del equilibrio, existiendo ciertos casos límites donde la media de la respuesta Hall se acerca a los invariantes topológicos (números de Chern) calculados en forma estacionaria a partir de las bandas de Floquet. Se analizó en particular el modelo de un encendido de masa en el hamiltoniano de Dirac. A través del mismo y de un formalismo de dos tiempos se logró describir con fidelidad la dinámica lenta de la función de onda alrededor de estas degeneraciones y por ende de la $\sigma_{xy}(\tau)$ en el sistema irradiado. En el caso del grafeno dopado de forma tal de hacer coincidir el potencial químico con el gap dinámico de Floquet en el borde de zona ($\varepsilon_F = -\hbar\Omega/2$) se encontró una buena concordancia con la contribución al Chern proveniente de los estados de borde generados en estos gaps. Se comprende que a pesar de que el número de Chern se mantiene robusto ante la evolución unitaria de los estados de Bloch, la conductividad Hall brinda información relevante para la caracterización de la topología, ya que la misma no está relacionada directamente a esta magnitud.

Naturalmente, queda como trabajo futuro extender este estudio a sistemas con interacciones que den lugar a una vida media finita de las excitaciones y el cálculo de las respuestas dinámicas introduciendo mecanismos de relajación en la evolución de los estados de Bloch. Se espera que la consideración de efectos de disipación estabilice el valor medio de la respuesta Hall. Queda pendiente también analizar estos problemas en presencia de campos magnéticos considerablemente grandes. Será parte del estudio analizar si es posible mediante estas técnicas pulsadas obtener información sobre la modificación de los niveles de Landau en estos sistemas.

Bibliografía

- [1] Hasan, M. Z., Kane, C. L. Colloquium : Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, **82** (4), 3045–3067, nov 2010. [1](#), [9](#)
- [2] Qi, X.-L., Zhang, S.-C. Topological insulators and superconductors. *Reviews of Modern Physics*, **83** (4), 1057–1110, oct 2011. [1](#)
- [3] Thouless, D. J., Kohmoto, M., Nightingale, M. P., den Nijs, M. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters*, **49** (6), 405–408, aug 1982. [1](#), [49](#)
- [4] Haldane, F. D. M. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the “parity anomaly”. *Phys. Rev. Lett.*, **61** (18), 2015–2018, 1988. [1](#)
- [5] Jotzu, G., Messer, M., Desbuquois, R., Lebrat, M., Uehlinger, T., Greif, D., *et al.* Experimental realization of the topological haldane model with ultracold fermions. *Nature*, **515** (7526), 237–240, 2014. [2](#)
- [6] Karch, J., Drexler, C., Olbrich, P., Fehrenbacher, M., Hirmer, M., Glazov, M. M., *et al.* Terahertz radiation driven chiral edge currents in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, **107** (27), dec 2011. [2](#)
- [7] Wang, Y. H., Steinberg, H., Jarillo-Herrero, P., Gedik, N. Observation of floquet-bloch states on the surface of a topological insulator. *Science*, **342** (6157), 453–457, 2013. [2](#), [26](#)
- [8] Rechtsman, M. C., Zeuner, J. M., Plotnik, Y., Lumer, Y., Podolsky, D., Dreisow, F., *et al.* Photonic floquet topological insulators. *Nature*, **496** (7444), 196–200, 2013. [2](#)
- [9] Dehghani, H., Oka, T., Mitra, A. Dissipative floquet topological systems. *Phys. Rev. B*, **90** (19), nov 2014. [2](#)
- [10] Budich, J. C., Heyl, M. Dynamical topological order parameters far from equilibrium. *Phys. Rev. B*, **93** (8), feb 2016. [2](#)

- [11] Rudner, M. S., Lindner, N. H., Berg, E., Levin, M. Anomalous edge states and the bulk-edge correspondence for periodically driven two-dimensional systems. *Phys. Rev. X*, **3** (3), jul 2013.
- [12] Dehghani, H., Oka, T., Mitra, A. Out-of-equilibrium electrons and the hall conductance of a floquet topological insulator. *Phys. Rev. B*, **91** (15), apr 2015. [3](#), [54](#), [66](#)
- [13] Kitagawa, T., Oka, T., Brataas, A., Fu, L., Demler, E. Transport properties of nonequilibrium systems under the application of light: Photoinduced quantum hall insulators without landau levels. *Phys. Rev. B*, **84** (23), dec 2011.
- [14] Lababidi, M., Satija, I. I., Zhao, E. Counter-propagating edge modes and topological phases of a kicked quantum hall system. *Physical Review Letters*, **112** (2), jan 2014.
- [15] Hu, Y., Zoller, P., Budich, J. C. Dynamical buildup of a quantized hall response from nontopological states. *Physical Review Letters*, **117** (12), sep 2016. [2](#)
- [16] Aidelsburger, M., Atala, M., Nascimbène, S., Trotzky, S., Chen, Y.-A., Bloch, I. Experimental realization of strong effective magnetic fields in an optical lattice. *Phys. Rev. Lett.*, **107** (25), dec 2011. [2](#)
- [17] Struck, J., Ölschläger, C., Weinberg, M., Hauke, P., Simonet, J., Eckardt, A., *et al.* Tunable gauge potential for neutral and spinless particles in driven optical lattices. *Phys. Rev. Lett.*, **108** (22), may 2012.
- [18] Atala, M., Aidelsburger, M., Lohse, M., Barreiro, J. T., Paredes, B., Bloch, I. Observation of chiral currents with ultracold atoms in bosonic ladders. *Nat Phys*, **10** (8), 588–593, jul 2014.
- [19] Aidelsburger, M., Lohse, M., Schweizer, C., Atala, M., Barreiro, J. T., Nascimbène, S., *et al.* Measuring the chern number of hofstadter bands with ultracold bosonic atoms. *Nature Physics*, **11** (2), 162–166, dec 2014.
- [20] Flaschner, N., Rem, B. S., Tarnowski, M., Vogel, D., Luhmann, D.-S., Sengstock, K., *et al.* Experimental reconstruction of the berry curvature in a floquet bloch band. *Science*, **352** (6289), 1091–1094, may 2016. [2](#)
- [21] D'Alessio, L., Rigol, M. Dynamical preparation of floquet chern insulators. *Nature Communications*, **6**, 8336, oct 2015. [2](#), [51](#)
- [22] Calvo, H. L., Pastawski, H. M., Roche, S., Foa Torres, L. E. F. Tuning laser-induced band gaps in graphene. *Appl. Phys. Lett.*, **98** (23), 232103, 2011. [2](#)

- [23] Usaj, G., Perez-Piskunow, P. M., Foa Torres, L. E. F., Balseiro, C. A. Irradiated graphene as a tunable floquet topological insulator. *Phys. Rev. B*, **90** (11), 2014. [10](#), [13](#), [14](#), [15](#)
- [24] Perez-Piskunow, P. M., Foa Torres, L. E. F., Usaj, G. Hierarchy of floquet gaps and edge states for driven honeycomb lattices. *Physical Review A*, **91** (4), apr 2015. [2](#)
- [25] Bostwick, A., Ohta, T., Seyller, T., Horn, K., Rotenberg, E. Quasiparticle dynamics in graphene. *Nat Phys*, **3** (1), 36–40, 2006. [2](#)
- [26] Liu, Y., Bian, G., Miller, T., Chiang, T.-C. Visualizing electronic chirality and berry phases in graphene systems using photoemission with circularly polarized light. *Phys. Rev. Lett.*, **107** (16), 2011. [2](#), [27](#), [28](#), [32](#)
- [27] Higuchi, T., Heide, C., Ullmann, K., Weber, H. B., Hommelhoff, P. Light-field driven currents in graphene. *Arxiv: 1607.04198*, jul 2016. [3](#)
- [28] Oka, T., Aoki, H. Photovoltaic hall effect in graphene. *Phys. Rev. B*, **79** (8), 2009. [3](#), [9](#), [54](#)
- [29] Foa Torres, L. E. F., Perez-Piskunow, P. M., Balseiro, C. A., Usaj, G. Multiterminal conductance of a floquet topological insulator. *Phys. Rev. Lett.*, **113** (26), dec 2014. [3](#), [70](#)
- [30] Caio, M. D., Cooper, N. R., Bhaseen, M. J. Quantum quenches in chern insulators. *Phys. Rev. Lett.*, **115** (23), dec 2015. [3](#)
- [31] Barnes, E., Sarma, S. D. Analytically solvable driven time-dependent two-level quantum systems. *Physical Review Letters*, **109** (6), aug 2012. [6](#)
- [32] Breuer, H., Holthaus, M. Quantum phases and landau-zener transitions in oscillating fields. *Physics Letters A*, **140** (9), 507–512, oct 1989. [7](#)
- [33] Drese, K., Holthaus, M. Floquet theory for short laser pulses. *The European Physical Journal D - Atomic, Molecular and Optical Physics*, **5** (1), 119–134, jan 1999. [7](#)
- [34] Schiff, L. I. Quantum Mechanics. McGraw-Hill International Series in Pure and Applied Physics, Third Edition., 1968. [7](#)
- [35] Berry, M. V. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **392** (1802), 45–57, 1984. [9](#)

-
- [36] Gu, Z., Fertig, H. A., Arovas, D. P., Auerbach, A. Floquet spectrum and transport through an irradiated graphene ribbon. *Phys. Rev. Lett.*, **107** (21), nov 2011. [10](#)
- [37] Lovey, D. A., Usaj, G., Foa Torres, L. E. F., Balseiro, C. A. Floquet bound states around defects and adatoms in graphene. *Phys. Rev. B*, **93** (24), jun 2016. [10](#)
- [38] Ezawa, M. A topological insulator and helical zero mode in silicene under an inhomogeneous electric field. *New Journal of Physics*, **14** (3), 033003, 2012. [18](#)
- [39] Braun, J., Rausch, R., Potthoff, M., Minár, J., Ebert, H. One-step theory of pump-probe photoemission. *Phys. Rev. B*, **91** (3), 2015. [22](#)
- [40] Shirley, E. L., Terminello, L. J., Santoni, A., Himpsel, F. J. Brillouin-zone-selection effects in graphite photoelectron angular distributions. *Phys. Rev. B*, **51** (19), 13614–13622, 1995. [28](#)
- [41] Moreau, E., Godey, S., Wallart, X., Razado-Colambo, I., Avila, J., Asensio, M.-C., *et al.* High-resolution angle-resolved photoemission spectroscopy study of monolayer and bilayer graphene on the c-face of SiC. *Phys. Rev. B*, **88** (7), 2013. [28](#)
- [42] Xiao, D., Chang, M.-C., Niu, Q. Berry phase effects on electronic properties. *Reviews of Modern Physics*, **82** (3), 1959–2007, jul 2010. [49](#)
- [43] Wang, P., Schmitt, M., Kehrein, S. Universal nonanalytic behavior of the hall conductance in a chern insulator at the topologically driven nonequilibrium phase transition. *Phys. Rev. B*, **93** (8), feb 2016. [51](#)
- [44] Zener, C. Non-adiabatic crossing of energy levels. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, **137** (833), 696–702, 1932. [60](#)
- [45] Privitera, L., Santoro, G. E. Quantum annealing and nonequilibrium dynamics of floquet chern insulators. *Phys. Rev. B*, **93** (24), jun 2016. [66](#)

Publicaciones asociadas.

1. Peralta Gavensky, L., Usaj G., Balseiro C. A., Photo-electrons unveil topological transitions in graphene-like systems. Sci. Rep. 6, 36577; doi: 10.1038/srep36577 (2016).

SCIENTIFIC REPORTS

OPEN

Photo-electrons unveil topological transitions in graphene-like systems

Lucila Peralta Gavensky¹, Gonzalo Usaj^{1,2} & C. A. Balseiro^{1,2}

Received: 06 June 2016

Accepted: 12 October 2016

Published: 11 November 2016

The topological structure of the wavefunctions of particles in periodic potentials is characterized by the Berry curvature Ω_{kn} whose integral on the Brillouin zone is a topological invariant known as the Chern number. The bulk-boundary correspondence states that these numbers define the number of edge or surface topologically protected states. It is then of primary interest to find experimental techniques able to measure the Berry curvature. However, up to now, there are no spectroscopic experiments that proved to be capable to obtain information on Ω_{kn} to distinguish different topological structures of the bulk wavefunctions of semiconducting materials. Based on experimental results of the dipolar matrix elements for graphene, here we show that ARPES experiments with the appropriate x-ray energies and polarization can unambiguously detect changes of the Chern numbers in dynamically driven graphene and graphene-like materials opening new routes towards the experimental study of topological properties of condensed matter systems.

Topology plays a central role in defining the structure of the ground state of condensed matter systems, the nature of the excitations and their response to external probes^{1–4}. For particles in periodic potentials, like electrons in solids, cold atoms systems or photonic crystals, the topology of the Bloch wavefunctions is related to the geometric or Berry phase acquired by the particle as it moves along a closed path in reciprocal space⁵. Within a given energy band, these phases are characterized by the Berry curvature (Ω_{kn}) whose integral over the Brillouin zone (BZ) is a topological invariant, the Chern number.

According to the bulk-boundary correspondence principle, the Chern numbers determine the unbalance in the number of chiral edge (or surface) states¹. Experimentally, it has been easier to study the effects of a non-trivial topology, *i.e.* the emergence of such chiral edge states, rather than its origin: the structure of the Bloch wavefunctions across the whole BZ. In fact, transport and spectroscopic experiments provide direct evidence on the existence of the edge states^{6–9}. Extracting information on Ω_{kn} and its integral in the BZ as a measure of topology in condensed matter systems has been more elusive.

Since it is Ω_{kn} what encodes all the information on topology and non-local effects it is natural to look for ways of obtaining direct information about this quantity—even in systems with trivial topology Ω_{kn} is associated with anomalous velocities^{5,10,11} and may lead to non-local conductances and unconventional (valley) Hall effects. Ultra-cold atoms in optical lattices offer a unique playground for the study of topological band structures¹² and during the last years a number of experiments focused on the study of different structures, including hexagonal lattices with bosonic and fermionic atoms. In particular, recent experiments were able to obtain a complete tomographic image of the Berry curvature of a Bloch band¹³. No such experiments, that require a fast switching off of the confining (lattice) potentials, are possible in solids.

The question then arises as to what experiments could give direct information on the topological structure of the Bloch wavefunctions in condensed matter systems. The high resolution angle resolved photoemission spectroscopy (ARPES) has proven to be a powerful tool to measure the dispersion relation of low energy bands⁷, the band structure of dynamically driven systems (Floquet spectrum)^{14,15}, quasiparticle lifetimes and even the chiral nature of the electronic states in graphene systems¹⁶. In the latter case, ARPES experiments show that the intensity patterns have an angular dependence that give direct information of the Berry's phase. This is due to the fact that graphene's wavefunctions are spinors corresponding to the pseudo-spin associated with the two sublattices of the hexagonal structure. Then, close to the Dirac points, the pseudo-spin is parallel to the crystal momentum leading to a nontrivial Berry phase of π . Similar results are obtained in bilayer graphene where the winding angle is 2π . However, neither the band structure nor the Berry phase around the Dirac cones provide enough information to fully characterize the topological structure of the bands.

¹Centro Atómico Bariloche and Instituto Balseiro, Comisión Nacional de Energía Atómica, 8400 Bariloche, Argentina.

²Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina. Correspondence and requests for materials should be addressed to C.A.B. (email: balseiro@cab.cnea.gov.ar)

Agradecimientos

Quiero agradecer en primer lugar a Carlos, quien no sólo me introdujo al maravilloso mundo de la materia condensada como profesor sino también me ha guiado a lo largo de este comienzo con entusiasmo y dedicación. He aprendido tanto enfrentada a pizarrones con tiza en mano con su pasión contagiosa por la física como de su excelente calidad de persona.

A Gonzalo, quien siempre estuvo presente para tenderme una mano y del cual aprendí tanta física. Las charlas y discusiones que hemos mantenido a lo largo de este año han sido de gran ayuda para enriquecer este trabajo.

A mis compañeros de la carrera: Mati, Timo, Martín, Ariel, Leo, Javi, Franco, Tucho, Johann, Arturo y Lucas, quienes siempre me han hecho sentir parte, me han ayudado a seguir adelante y a confiar un poco más en mí misma. Por sobre todas las cosas su amistad es para mí uno de los más valiosos estandartes de esta aventura.

A Alex Fainstein, quien estuvo allí cuando necesité superar mis propios miedos y desconciertos al comenzar este camino, sin él no hubiera podido llegar a esta instancia.

Agradecer no es suficiente en cuanto se trata de mi familia, mis compinches, mis siempre aliados en esta vida que en la distancia me han apoyado a lo largo de esta breve pero intensa carrera. Gracias a mi madre, Lilia, con su personalidad fuerte y a la vez emotiva, que me ha enseñado sin siquiera proponérselo que las mujeres tenemos una voz - que decidí reflejar en las citas incluidas en los capítulos de este trabajo - a pesar de que a veces nos la quieran quitar. Su voz y su risa son y serán siempre para mí las más valiosas. Mi padre, Daniel, un soñador innato que me llevó a recorrer en mi infancia estos pagos sureños en casa rodante.. quién sabe, quizás por eso decidí volver para seguir cumpliendo anhelos. Gracias viejo, for all that jazz.

A mi hermana Marina, mi maestra de la niñez, compañera de vivencias a quien le tengo un cariño infinito. A mis hermanos Noel y Ramiro, con sus familias tan hermosas, que siempre me han apoyado y abierto las puertas. A los abuelos que ya no están más, Juan José y Elda, que me enseñaron ya de pequeña que los libros y el arte ennoblecen el espíritu.